

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ “ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА”

ТОРСЬКА РОКСАНА ВОЛОДИМИРІВНА



УДК 519.876.5, 004.942

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗВИТКУ
ПІТІНГОПОДІБНИХ ДЕФЕКТІВ МЕТОДОМ КОМІРКОВИХ
АВТОМАТІВ**

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Львів – 2017

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у Фізико-механічному інституті
ім. Г.В. Карпенка НАН України.

Науковий керівник: доктор технічних наук, професор
Русин Богдан Павлович,
Фізико-механічний інститут
ім. Г.В. Карпенка НАН України, завідувач
відділу методів та систем дистанційного
зондування

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, старший науковий
співробітник
Журавчак Любов Михайлівна,
Національний університет «Львівська
політехніка» МОН України, професор
кафедри програмного забезпечення;

кандидат технічних наук, доцент
Пукас Андрій Васильович,
Тернопільський національний
економічний університет МОН України,
завідувач кафедри комп'ютерних наук.

Захист відбудеться 30 березня 2017 року о 14⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.052.05 у Національному університеті «Львівська політехніка» (79013, м. Львів, вул Професорська, 2, ауд. 218).

З дисертацією можна ознайомитись у науково-технічній бібліотеці Національного університету «Львівська політехніка» (79013, м. Львів, вул С. Професорська 1).

Автореферат розіслано 28 лютого 2017 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради,
доктор технічних наук, професор



Р. А. Бунь

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Пітингова корозія металів та сплавів – один з найпоширеніших видів руйнування поверхонь матеріалів, який супроводжується утворенням пітингів, що стають концентраторами напружень та можуть призвести до утворення тріщин, прискоривши ураження структурних компонентів, спричинених втомою металу з подальшою їхньою руйнацією.

Моделювання процесів поверхневої корозії металів та сплавів полягає у відтворенні форми пітингів та пітингоподібних дефектів. Серед існуючих на сьогоднішній день моделей та методів прогнозу пітингової корозії необхідно відзначити методи скінченних елементів, Монте-Карло та коміркових автоматів. Згідно проведеної порівняльної характеристики цих моделей встановлено, що найбільш точні результати при відтворенні процесів корозії та форми профілю внутрішньої поверхні дефектів забезпечує саме симуляція методом коміркових автоматів.

Недоліком описаних вище методів математичного моделювання є те, що отримана інформація про форму рельєфу дна дефектів є неточною, оскільки вони базуються лише на основі спрощеної моделі, у якій не враховуються всі етапи розвитку пітингоподібних дефектів, зокрема імовірність репасивації. Прогнози щодо характеру ураження поверхневою корозією, які одержані на основі такого аналізу не відображають реальної ситуації. Особливо це стосується металів та сплавів, схильних до пасивації. Тому дослідження та прогнозування морфології корозійних ушкоджень є надзвичайно важливим для досягнення та збереження цілісності матеріалів та конструкцій (високовольтних ліній електропередач, нафтогазопроводів, листів теплообмінників, обшивки літаків та інших транспортних засобів).

Розвинуті в роботі положення базуються на здобутку таких вчених як: Дж. фон Нейман, С. Ульман, Г. Бурштейн, Б. Малкай, Б. Баро, Дж. Сон'єр, Р. Підапарті, С. Вольфрам, Б.П. Русин, В.І. Похмурський, М.С. Хома, Г. Френкель, Б. Чопард, Т. Тоффоли.

Тому особливо актуальним науковим завданням є розробка нових та удосконалення існуючих моделей та методів математичного моделювання на базі коміркових автоматів, які б дозволяли враховувати: особливості структури металу чи сплаву, вплив зовнішніх умов, за яких відбуваються процеси корозії та дегенеративні зміни конструкційних матеріалів, правильний підбір оптимальної кількості параметрів, що закладаються у модель розвитку пітингоподібних пошкоджень.

Зв'язок роботи із науковими програмами, планами, темами. Дослідження, покладені в основу дисертаційної роботи, виконано у відділі методів та систем дистанційного зондування Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка НАН України в межах держбюджетної науково-дослідної теми за відомчим замовленням НАН України «Розроблення інформаційних технологій діагностики елементів конструкцій, уражених корозійними виразками» (номер державної реєстрації 0114U004007), а також «Розроблення методів виявлення та класифікації корозійних пітингів на основі автоматизованої обробки зображень» (номер державної реєстрації 0111U002380), де автор розробила спосіб підвищення точності моделювання пітингової корозії на металічних поверхнях методом коміркових автоматів.

Мета і задачі дослідження. Метою дисертаційної роботи є підвищення точності методу моделювання росту та розвитку пошкоджень на металічних поверхнях, внаслідок руйнівної дії пітингової корозії на підставі використання коміркових автоматів та встановлення закономірностей впливу температури та агресивного

середовища на швидкість протікання поверхневої корозії та глибини пітингоподібних дефектів.

Відповідно до поставленої мети, дисертаційна робота включала розв'язання таких завдань:

- аналіз існуючих підходів моделювання пітингової корозії із обґрунтуванням їхніх переваг та недоліків;
- розроблення методу моделювання процесів корозії на базі використання коміркових автоматів;
- підбір оптимального околу для комірки автомата;
- дослідження адекватності розроблених математичних моделей;
- розробка програмного забезпечення та проведення експериментальних досліджень;
- верифікація даного підходу та оцінка його точності.

Об'єкт дослідження: процеси пітингової корозії та розвитку пітингоподібних пошкоджень на поверхнях металів та сплавів.

Предмет дослідження: математичні моделі процесів розвитку пітингоподібних пошкоджень на металічних поверхнях.

Методи дослідження:

- метод коміркових автоматів, положення і методи теорії графів, теорії оцінювання, теорії розпізнавання, обчислювальні методи для розробки математичних моделей;
- методи теорії оцінювання, теорії ймовірностей і теорії прийняття рішень;
- методи статистичного моделювання для перевірки адекватності моделі.

Наукова новизна одержаних результатів. На основі теоретичних та експериментальних досліджень, проведених у дисертаційній роботі:

- вперше розроблено математичну модель розвитку пітингоподібних дефектів на основі коміркових автоматів, яка дає можливість встановити залежності між глибиною та формою пітинга від рівня рН агресивного середовища, температурою та тривалістю перебігу процесу корозії;
- удосконалено метод задання локальних правил переходу для коміркового автомата, шляхом врахування катодно-анодних реакцій, процесів дифузії, пасивації, репасивації, які відбуваються при пітинговій корозії, який на відміну від відомих, вперше відображає перехід від активного розчинення металу на поверхні до стадії метастабільного росту пітинга;
- вперше обґрунтовано варіант вибору околу комірки автомата на основі оточення фон Неймана II-го порядку, до якого входить 12 найближчих комірок, що дає змогу підвищити точність моделювання без зростання обчислювальної складності та часових затрат, в порівнянні з оточенням Мура II-го порядку, яке використовувалось у відомих методах;
- вперше встановлено закономірності впливу технологічних параметрів режиму росту пітингів, зміни геометричних розмірів та форми дефектів від типу агресивного середовища, що дають змогу оцінити без тривалих натурних випробувань залишковий ресурс для виробів із металів та сплавів, схильних до корозії.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані результати можуть бути застосовані при розробці систем передбачення довговічності металічних конструкцій в агресивних зовнішніх умовах при циклічних навантаженнях.

Наукові та практичні результати, що стосуються підвищення точності моделювання пітингової корозії на металічних поверхнях із використанням коміркових

автоматів (патент на корисну модель № 99736), знайшли використання на ПАТ «Укртрансгаз» та ПАТ «Укртрансгаз».

Отримані в дисертаційній роботі результати використано при розробці програмного забезпечення для задач моделювання процесів пітингової корозії на металічних поверхнях методом коміркових автоматів, що дає змогу значно підвищити ефективність та достовірність прогнозування імовірнісних пошкоджень, оцінити параметри дефектів, а також зменшити роль і обсяги експериментальних досліджень.

Вдосконалено процес переходу коміркового автомата із імітації одного етапу розвитку пітинга до наступного та симуляцію росту пітингоподібних пошкоджень, шляхом врахування імовірності переходу поверхневого дефекту до етапу репасивації, що дозволило підвищити точність моделювання в середньому на 15% у порівнянні із існуючими методами.

Особистий внесок здобувача. Усі результати, які складають основний зміст дисертаційної роботи, отримані автором самостійно. У працях, що опубліковані у співавторстві, здобувачу належать: розробка методу чисельної симуляції пітингової корозії на базі підходу із використанням коміркових автоматів [1–4]; підбір локальних правил переходу для комірок автоматів [5–8]; підготовка і виконання експериментальних досліджень [9–12]; розробка та створення нового методу підвищення точності моделювання пітингової корозії на металічних поверхнях із використанням коміркових автоматів [13] та використання запропонованого методу для точнішого прогнозування швидкості росту та глибини пітингоподібних пошкоджень.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень та основні положення роботи доповідались та обговорювались на V міжнародній науковій конференції «Informatyka w dobie XXI wieku» (Poland, 2011); міжнародній науково-технічній інтернет-конференції «Комп'ютерна графіка та розпізнавання зображень» (Вінниця, 2012); XXIII і XXIV відкритих науково-технічних конференціях молодих науковців і спеціалістів Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка НАН України, КМН (Львів, 2013, 2015); International Conference on Man-Machine Interactions (Poland, 2013); XII міжнародній конференції «Проблеми корозії та протикорозійного захисту конструкційних матеріалів» (Львів, 2014); III українсько-німецькій конференції «Інформатика. Культура. Техніка» (Одеса, 2015); Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (L`viv-Slavs`ke, 2016).

Публікації. За темою дисертаційного дослідження опубліковано 16 наукових праць, з яких 10 статей у фахових наукових виданнях, 5 публікацій у матеріалах конференцій та патент на корисну модель.

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків та переліку літературних джерел. Загальний обсяг роботи становить 150 сторінки, з них 119 сторінок основного тексту, у тому числі 49 рисунків, 4 таблиці та список використаної літератури з 204 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** наведено загальну характеристику роботи, обґрунтовано актуальність теми, окреслено її джерельну базу, сформульовано мету, основні задачі досліджень, визначено наукову новизну та практичне значення основних результатів, наведено відомості про їхню апробацію та реалізацію.

У **першому розділі** наведено огляд та критичний аналіз літературних джерел з питань прогнозування пітингової корозії та методів моделювання швидкості росту та параметрів пітингоподібних дефектів. Подано короткі відомості про природу

виникнення дефектів, оцінено вплив локальних корозійних уражень на довговічність металічних конструкцій.

У розділі показано, що область застосування методів прогнозу залежить від конкретних ситуацій, оскільки процеси, які відбуваються при пітинговій корозії всередині дефектів є складними та багаторівневими. Математичне моделювання часто застосовується у фундаментальних дослідженнях для встановлення закономірностей перебігу процесів корозії у досліджуваній системі. У зв'язку з цим показано, що актуальним є питання про підвищення ефективності прогнозу пітингової корозії, що передбачає зменшення складності його складових етапів.

Поглиблення розуміння процесів еволюції корозії має практичне застосування при розробці стійких до корозії матеріалів та прогнозування структурної цілісності металічних конструкцій.

Істотний інтерес зосереджувався на морфології корозії, але мало уваги приділялось тривимірній симуляції росту. Розглянуто 2D-моделі точкової корозії. Встановлено, що немає чітких моделей еволюції пітингової корозії на основі локальних правил переходу.

Літературний огляд показав, що найбільш ефективним інструментом для дослідження процесу зародження та кінетики росту пітингів є коміркові автомати. Тому метою цієї роботи є застосування останніх для отримання зображень пітингів при їх симуляції.

Другий розділ присвячено розробленню моделі із використанням методу коміркових автоматів для моделювання розвитку такої динамічної системи як ріст пітингоподібних дефектів на поверхні металів та сплавів.

Для цього, значну увагу приділено питанню зниження обчислювальної складності процесу моделювання, шляхом застосування удосконаленого підходу на базі коміркових автоматів із застосуванням сусідства фон Неймана II-го порядку (12 найближчих сусідів із оточення комірки) для відтворення процесів зародження та росту пітингової корозії.

При такому підході, запропонована модель представлена графічно у вигляді скінченних двовимірних коміркових автоматів на прямокутній ґратці, де система «метал/плівка/агресивне середовище» описується набором елементарних комірок та множиною заданих станів, у яких можуть перебувати ці комірки.

На кожному кроці моделювання процедури, визначається отримана конфігурація комірок та розраховується кількість розчиненого металу, як функція часу. Важливим є те, що час моделювання тут є довільним.

У процесі еволюції коміркового автомата, кожна комірка змінює свій стан згідно заданих правил переходу, які залежать від її початкового стану та станів сусідніх комірок. Основним завданням, при підборі правил переходу є максимально достовірний опис реальних процесів, що відбуваються всередині пітингоподібного дефекту.

Локальні правила переходу враховують анодні реакції, процеси дифузії, пасивації та репасивації: 1) анодні реакції моделюють поведінку комірок при розчиненні металу всередині пітинга; 2) процеси пасивації, відтворюють перехід комірок, що відповідають за «метал», від стану пасивності до стану активності, коли кислотність середовища підвищується; 3) опис дифузійних процесів моделюють рух комірок «металу» у агресивному середовищі.

Особливість даної моделі є те, що опис будь-яких процесів можна здійснювати як імовірнісним методом, так і задаючи їх у вигляді диференціальних рівнянь, підбираючи той варіант, який забезпечить найвищу точність результату моделювання.

З огляду на це, висувається припущення, що дифузія електроліту є контрольованою, тобто відбувається рівномірне розчинення системи «метал/агресивне середовище» та ігноруються будь-які хімічні зміни у процесі розчинення.

Перед початком симуляції приймаємо, що в центральній комірці автомата джерело зародження пітингоподібного дефекту уже ініційоване (тобто вказана позиція

S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S
S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S
F	F	F	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S	F	F	F	F
M	M	I	S	S	S	S	S	S	S	S	F	S	S	F	M	M	M
M	M	I	C	S	S	S	S	S	S	S	S	S	F	M	M	M	M
M	M	M	I	S	S	S	S	S	S	S	S	S	C	M	M	M	M
M	M	I	C	S	S	S	S	S	S	F	S	S	I	M	M	M	M
M	M	M	I	I	S	S	F	S	S	S	S	F	I	M	M	M	M
M	M	M	M	I	F	S	S	S	S	S	F	C	I	M	M	M	M
M	M	M	M	M	I	C	S	F	S	I	I	I	M	M	M	M	M
M	M	M	M	M	M	I	S	S	S	C	I	M	M	M	M	M	M
M	M	M	M	M	M	M	F	S	F	I	M	M	M	M	M	M	M
M	M	M	M	M	M	M	I	C	C	M	M	M	M	M	M	M	M
M	M	M	M	M	M	M	M	I	C	M	M	M	M	M	M	M	M
M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M	M

Рис. 1. Модель росту пітингоподібного дефекту у вертикальному поперечному зрізі

пробою пасивної плівки на поверхні зразка). Схематично модель росту пітинга під час симуляції подана на рис. 1.

Набір станів Q для описаної системи визначаємо так: F і M – комірки, що відображають запасивований та незапасивований метал, відповідно; I і C – початок та завершення стану кородування, відповідно; S – агресивне середовище.

Кожна комірka має обмежену кількість станів. Тобто кількість можливих станів рівна п'яти, але у певний момент часу вона може перебувати лише в одному із них.

Комірковий автомат (КА) розглядається як система, функцію якої

можна описати за допомогою використання внутрішніх станів $Q=\{q\}$ у такий спосіб, що для кожного внутрішнього стану зазначено, до якого наступного стану потрапить система, після отримання вхідних даних b (*begin*) і який результат e (*end*) буде отримано на виході. Зазначається початковий стан системи. У даному випадку автомат є скінченим, оскільки скінченим є набір станів комірок Q . Вхідні дані складаються із імовірностей переходу між комірками автомата: $W=\{w_{FI}, w_{IC}, w_{MS}, w_{SI}, w_{SC}\}$, а вихідні дані із зміни дислокації комірки:

$$E=\{x_{i,j}, x_{i-1,j}, x_{i-1,j+1}, x_{i,j+1}, x_{i+1,j+1}, x_{i+1,j}, x_{i+1,j-1}, x_{i,j-1}, x_{i-1,j-1}, x_{i-2,j}, x_{i,j+2}, x_{i+2,j}, x_{i,j-2}\},$$

де i, j – координати комірок, $x_{i,j}$ – обчислюваний стан комірки за оточення фон Неймана II-го порядку. Стан комірки відповідає субстанції чи етапу кородування, в якому перебуває ця точка простору у дефекті: $Q=\{M, F, S, I, C\}$. Для визначеності обираємо за початкові стани комірок: $q_0=\{M, S\}$. Параметри стану комірки та часу у функції стану приймають дискретні значення. Оскільки утворення пітингів є незворотнім, функція стану комірки зростає із часом. Відбувається приріст суми всіх впливів комірки самої на себе та її сусідів.

Імовірності пораховані згідно з результатами, отриманими із діаграми Пурбе, оскільки з її допомогою можна встановити межі термодинамічної можливості протікання електрохімічної корозії металів. Ця діаграма є графіком залежності оборотних електродних потенціалів від показника рН розчину для відповідних рівноважних станів із участю електронів та іонів.

За окіл КА обираємо оточення фон Неймана II-го порядку, до якого входить 12 найближчих комірок (рис. 2).

		$i, j+2$		
	$i-1, j+1$	$i, j+1$	$i+1, j+1$	
$i-2, j$	$i-1, j$	i, j	$i+1, j$	$i+2, j$
	$i-1, j-1$	$i, j-1$	$i+1, j-1$	
		$i, j-2$		

Рис. 2. Окіл коміркового автомата – оточення фон Неймана II-го порядку

Моделювання кінетики процесів пітингової корозії проводиться методом прямого імітаційного моделювання елементарних процесів. Основним об'єктом розгляду є мікроскопічний об'єм металу. Вважається, що сітка комірки імовірнісного КА c_i відповідає молекулярній структурі матеріалу, а стан комірок визначається типом молекул, які в них знаходяться. Також вважається, що зворотній процес зміни станів є неможливим. Крім того, у множину можливих переходів, між станами комірок КА J входять "нульові" процеси: $M \rightarrow M$, $F \rightarrow F$, $S \rightarrow S$, $I \rightarrow I$, $C \rightarrow C$.

Вибір процесів, які реалізуються на кожному кроці моделювання відбувається з допомогою рівномірно розподіленого генератора випадкових чисел θ у відповідності з імовірностями переходів w_{ij} . Тоді математична модель процесу матиме вигляд:

$$c_i = \{Q, q_0, \theta, J, W\},$$

де $\theta \in [0; 1]$, $J = \{(FI), (IC), (MS), (MF), (SI), (SC)\}$ – можливі переходи між станами комірок в КА. Новизна запропонованої моделі полягає у тому, що допускається перехід від E_n до стану E_{n-1} . Імовірність переходу пітинга у режим репасивації $P(\tau)$ визначається наступним чином:

$$\frac{dP(\phi)}{d\phi} = -\lambda P(\phi) + \mu[1 - P(\phi)], \quad (1)$$

де μ – швидкість репасивації, λ – середня швидкість зародження пітингів через час τ .

Імовірність зародження стабільних пітингів:

$$\Lambda = \delta e^{-\beta\tau_c}, \quad (2)$$

де δ – частота виникнення пітингів, β – імовірність виживання пітинга, τ_c – критичний вік пітинга.

Імовірність існування поверхні без пітинга:

$$P(0) - \ln[P(0)] = -S_p \Lambda (\tau_0 - \tau_c) / ([\tau_0] - \tau_c), \quad (3)$$

де S_p – площа поверхні, $[\tau_0]$ – очікуваний інкубаційний період виникнення стабільного пітинга.

Схематично запропоновану модель представлено у вигляді графа (рис. 3).

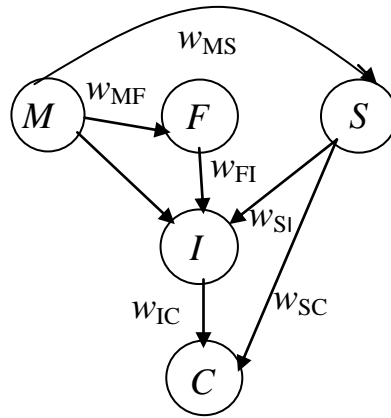


Рис. 3. Діаграма переходів для станів комірок КА при моделюванні пітингової корозії

Для реалізації представленої моделі був розроблений програмний продукт, з допомогою якого проводилось пряме імітаційне моделювання процесів пітингової корозії. Для аналізу адекватності результатів моделювання методом КА були проведені порівняння із результатами, отриманими експериментальним шляхом.

Під час пітингової корозії можуть утворюватися дефекти у вигляді виразок чи каверн відкритого типу або приховані під поверхнею напівпроникної мембрани із продуктів корозії. Каверни, що називаються пітингами можуть мати напівсферичну, напівеліпсоподібну чи куполоподібну форму. Але, зазвичай, багатьом матеріалам та сплавам притаманне утворення глибоких чи вузьких дефектів неправильної форми із складною геометрією дна. Швидкість росту та форма пітинга залежить саме від виду матеріалу. Однак, характеристикою дефекту, що цікавить нас найбільше, є саме його глибина, оскільки перфорація зменшує товщину металу, а отже, і його ресурс при експлуатації.

Заключним етапом є процес поєднання. Суть його полягає в упорядкуванні системи рівнянь у загальне рівняння, що описує систему у всій області. Іншими словами – необхідно поєднати локальні рівняння, що описують окремі елементи, які пов’язані між собою.

Побудова моделі при використанні методу КА складається із наступних етапів: визначення набору вхідних даних; визначення констант; побудова геометрії системи; визначення області та її меж; поділ досліджуваної області на окремі елементи; поєднання та розв’язок рівнянь, що описують елементи системи; обробка та оцінка результатів моделювання.

Для узагальненого опису форми пітингоподібного пошкодження використовувалась напівсферична модель (Burstein, Pistorius), проте вона лише дуже узагальнено та наближено описує, як саме може виглядати пітинг на поверхні

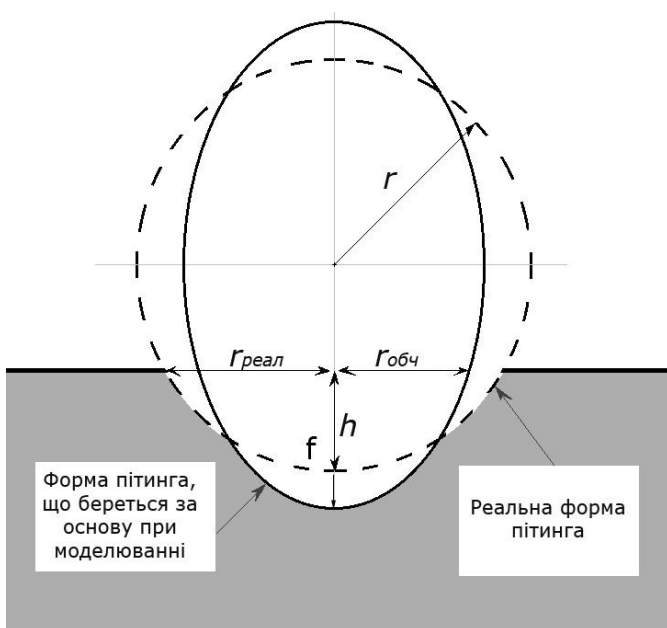


Рис. 4. Співвідношення між реальною формою пітинга та прогнозованою

матеріалів, тому запропоновано використовувати еліпсоїд обертання (рис. 4).

Використовуючи рівняння еліпса, можна обчислювати значення f для заданого радіусу дефекту, де f рівне r_n (перифокусній відстані):

$$r_n = f = a(1 - e),$$

або, через фокальний параметр p , який у нашому випадку рівний $r_{обч}$, де a – велика піввісь; b – мала піввісь; c – фокальна відстань; e – ексцентриситет. $r_{реал}$ – радіус реального дефекту; $r_{обч}$ – обчислений радіус прогнозованого дефекту; r – радіус кола, яке описує усереднену форму дефекту; h – глибина дефекту; f – фокус еліпсоїда, яким описується форма дефекту та шукана його глибина.

Таке наближення дозволяє охопити більшу множину можливих форм, у тому числі і випадок із сферою, якщо ексцентриситет прямує до нуля.

Третій розділ присвячено встановленню закономірностей впливу температури та порівнянню даних, отриманих шляхом моделювання із реальними даними про динаміку розвитку точкових пошкоджень на поверхні зразків. Практично підтверджена доцільність застосування запропонованого методу симуляції для моделювання процесів кородування сталей у нейтральних середовищах. Точність відтворення фізики процесів на мікро-рівні забезпечується врахуванням електрохімічних факторів, що беруть участь у формуванні досліджуваних дефектів.

Наведено рис. 5(а–с) змодельовані зображення пітингів та пітингоподібних дефектів за використання відомої моделі, де враховано лише чотири стани, у яких може перебувати комірка автомата (М, F, C та I), та зображення, отримані під час застосування запропонованої моделі, яка враховує п'ятий стан стану для комірок (агресивне середовище 5%-го розчину хлористого заліза) (М, F, C, I та S) рис. 5(d–f).

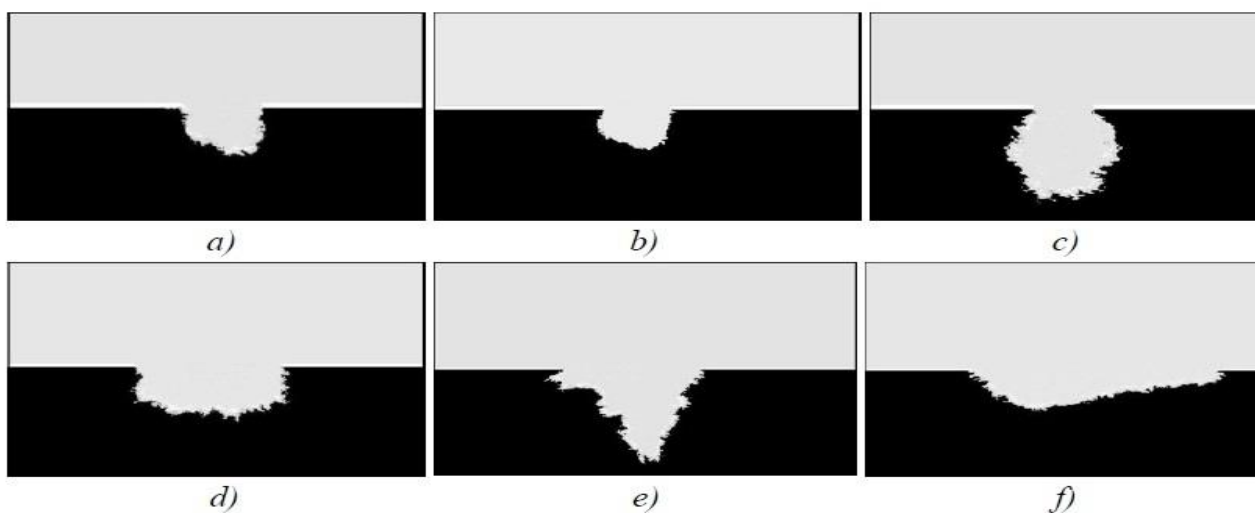


Рис. 5. Порівняння зображень профілів пітингів та пітингоподібних дефектів, отриманих шляхом моделювання за використання відомої моделі симуляції (а–с) та запропонованої (d–f)

Як видно із рис. 5, профілі у перших трьох випадках нагадують півсферу чи сферу, хоча реальні дефекти рідко мають правильну форму. Значно ширшими можливостями володіє запропонована модель, яка дає змогу моделювати складніші та різноманітніші пітингоподібні дефекти.

Виконано порівняльний аналіз зображень змодельованих пітингоподібних дефектів із зображеннями реальних, одержаних на зразках сплаву Д16Т під час його травлення у 5%-му розчині хлористого заліза (FeCl_3) впродовж 48 годин. Зразки

зважували та обробляли, згідно з ГОСТ 2789–73, а показники корозії визначались, згідно ГОСТ 9.908 – 85.

Встановлено, що дефекти, отримані симуляцією, за формою та параметрами відповідали тим одержаним методом прискорених випробувань у лабораторних умовах. За використання запропонованого методу моделювання можна передбачити утворення пітингоподібних дефектів не лише відкритого, а й частково закритого типу та отримати рельєф поверхні дна, оскільки природа їх утворення пояснюється різною товщиною і тривкістю оксидної плівки на поверхнях, а також – кислотністю агресивного середовища. Ці та інші чинники легко враховувати у запропонованій моделі. З огляду на це, важливо зазначити, що перспективним також є моделювання прихованих пітингів, але дослідити у реальних умовах це складно через обмеження методів мікроскопії та профілометрії (як контактної, так і безконтактної).

Досліджено приблизно по десять найбільших одиночних дефектів, утворених на різних поверхнях зразків дюралюмінію Д16Т. До їхніх основних геометричних характеристик слід віднести такі величини: умовний діаметр, об'єм та профіль одиночного дефекту, з якого точніше можна визначити деякі параметри, наприклад, співвідношення між глибиною та шириною.

Згідно з отриманими результатами, характер розвитку дефекту під час моделювання суттєво залежав від різних початкових умов – відмінними були форми змодельованого пітинга та рН на поверхні каверни, після завершення процедури симуляції. На рис. 6 показані зображення дефектів, отриманих шляхом моделювання запропонованим методом, та реальних пітингоподібних дефектів, отриманих експериментально під час травлення зразків Д16Т у 5%-му розчині хлористого заліза (FeCl_3) за кімнатної температури.

Як видно із рис. 6, моделювання забезпечує непогану відповідність між формою реальних та отриманих методом симуляції дефектів.

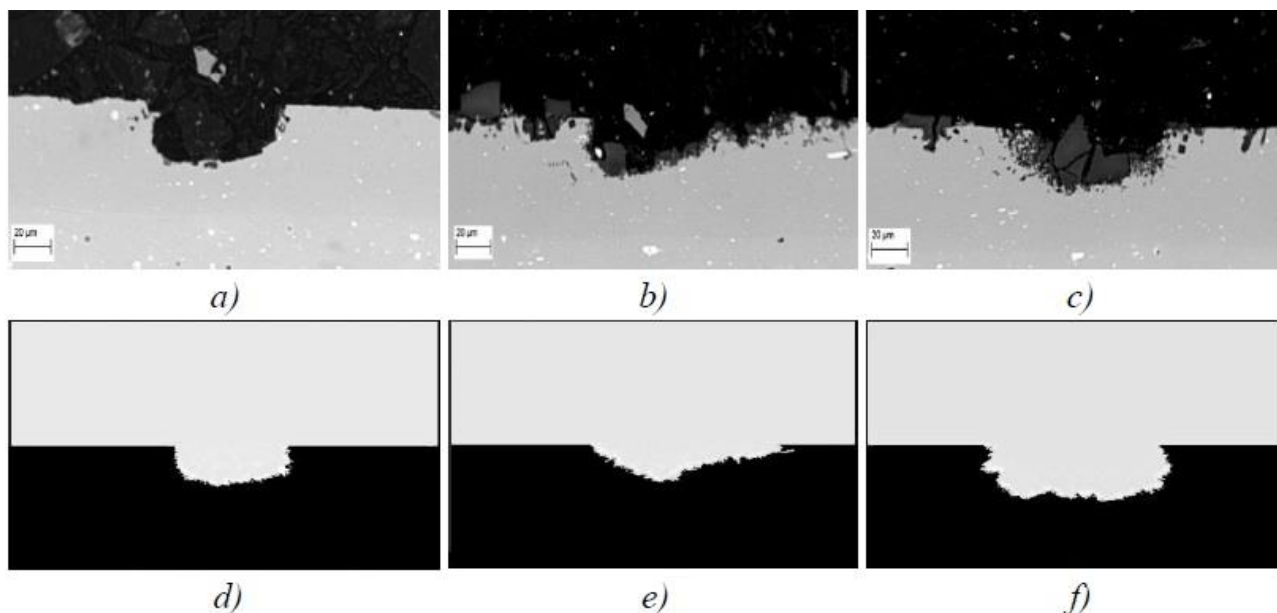


Рис. 6. Форми реальних пітингоподібних дефектів на зразках сплаву Д16Т (а–с) та змодельованих (d–f) для різних початкових значень показника рН (а, d–5, b, e–6, c, f–7) після завершення симуляції

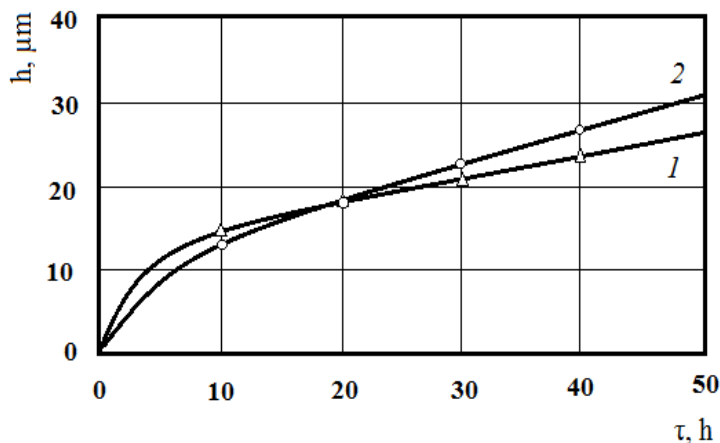


Рис. 7. Залежність глибини пітингоподібного дефекту від часу: 1 – результати для зразків сплаву Д16Т за прискорених випробувань; 2 – результати, отримані шляхом моделювання

Зіставлення результатів, отриманих під час моделювання із результатами, одержаними при роботі із реальними зразками, наведено у табл. 1. Подано по три серії випробувань та симуляції для середовища із різними показниками кислотності середовища.

Таблиця 1. – Зіставлення результатів, отриманих експериментально та шляхом моделювання із використанням коміркових автоматів

Середовище	Середня швидкість росту, мм/добу		Похибка, %
	Реальні дефекти	Змодельовані	
pH 5	0,55	0,61	1,88
pH 6	0,48	0,52	1,88
pH 7	0,42	0,49	2,15

Як бачимо, похибка є незначною, отже можна стверджувати, що запропонований метод забезпечує високу ступінь відповідності між показниками швидкості пітингової корозії сплаву Д16Т, отриманими експериментально та шляхом моделювання.

З метою уточнення ефективності методу моделювання комірковими автоматами проводились додаткові випробування із зміною умов перебігу корозії. На зразки дюралюмінієвого сплаву Д16Т наносився соляний розчин різних концентрацій та аналізувались результати кореляції швидкості корозії при симуляції та при натурно-прискорених випробуваннях.

Для досліджень застосовувалась морська сіль, отримана із води Чорного моря методом випарювання. Оцінку зміни швидкості корозії та металографічні дослідження проводили після 3, 6 та 12 місяців досліджень. Втрати механічних властивостей сплавів оцінювали після випробувань на протязі 1-го року.

Визначення швидкості корозії. У результаті нанесення сольових розчинів методом розпилювання на поверхні металу утворюється плівка електроліту, відбувається активація корозійного процесу. Час утворення перших дефектів складає порядку від двох до п'яти діб після початку випробувань (для порівняння для випробувань алюмінієвих сплавів у відкритій атмосфері, без нанесення сольових

Щоб оцінити ефективність запропонованої моделі, зіставили числові значення швидкості пітингової корозії, отримані під час прискорених випробувань на зразках Д16Т та в результаті моделювання. Критерієм для порівняння слугувала залежність глибини дефекту від часу, впродовж якого він утворювався.

На рис. 7 показані залежності, що відповідають середній швидкості росту пітингоподібних дефектів, де на осі абсцис відкладено час, упродовж якого відбувалось травлення зразка зі сплаву Д16Т, а на осі ординат – глибина утвореного дефекту.

розчинів, період утворення пітингів та виразок може сягати 10-16 діб). Вже через місяць, після початку натурно-прискорених випробувань, корозійні пошкодження займали більше 50% поверхні, а через 3 місяці – до 90%.

Як відомо, концентрація хлоридів є одним із факторів атмосферної дії, яка найбільше впливає на інтенсивність корозійного руйнування металічних матеріалів. Різні концентрації морської солі були обрані із метою отримання даних для розроблення методу моделювання розвитку пітингоподібних дефектів.

На рис. 8 показані графіки зміни швидкості корозії сплаву Д16Т у результаті натурно-прискорених випробувань на протязі одного року та в результаті моделювання. Характер зміни швидкості корозії при нанесенні морської солі у концентраціях 5 та 10 г/л практично не відрізняються, з чого можна зробити висновок про те, що моделлю добре описуються саме ті фактори, що мають значний вплив на зміну швидкості корозії.

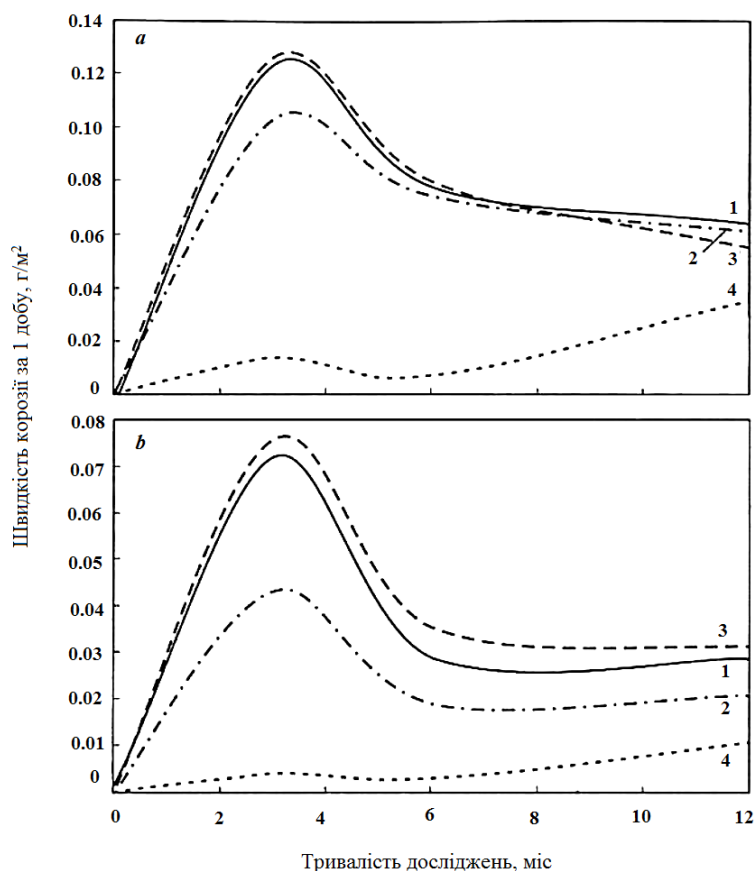


Рис. 8. Швидкість корозії зразків Д16Т (а) після натурно-прискорених випробувань на протязі одного року та моделювання (б) із нанесенням розчину солі із концентрацією 1(2), 5(1), 10 г/л (3) та без нанесення солі

Швидкість та характер корозії залежать не лише від хімічного складу агресивного середовища та самого матеріалу, а й від температури та швидкості її зміни. Вирішальну роль у цьому процесі відіграє природа та фізико-хімічні властивості плівки, яка утворюється продуктами корозії. В температурному інтервалі 55-65 °С спостерігається різке збільшення швидкості корозії. Це явище пояснюється тим, що за температур 55-95°С на поверхні металі утворюється зерниста плівка, яка володіє слабкими захисними властивостями. Крім того, з підвищенням температури, знижується розчинність кисню у агресивному середовищі (рис. 9). Також відслідковується певна закономірність залежності розмірів виразок від температурного режиму. При зростанні температури збільшується глибина дефектів (рис. 10).

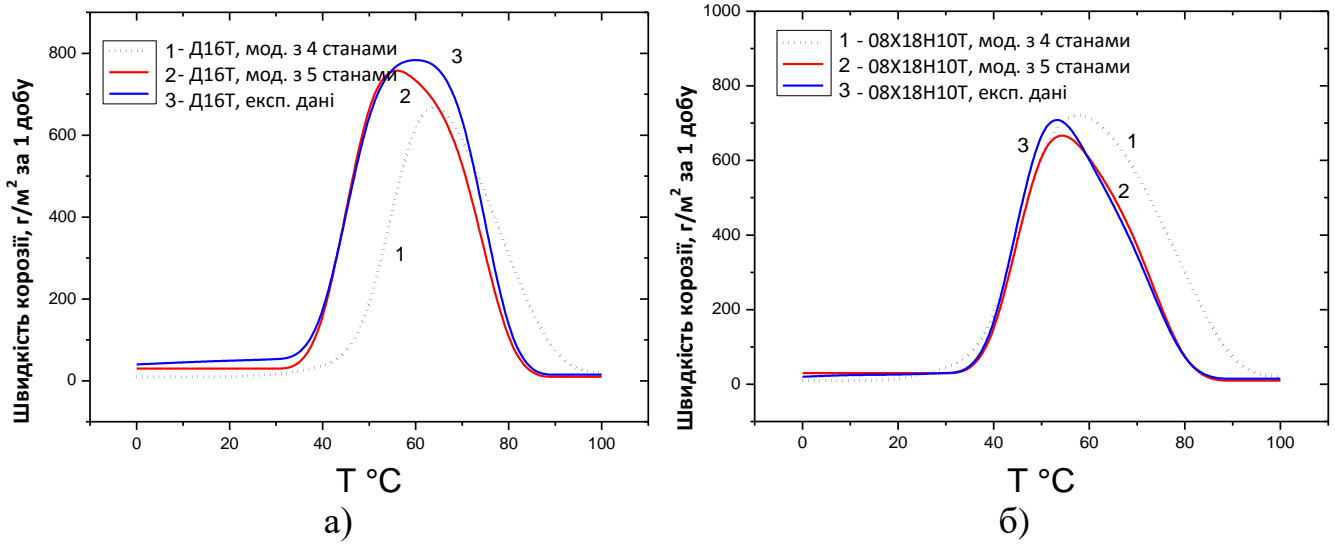


Рис. 9. Залежність швидкості корозії від температури, а) для зразків сплаву Д16Т та б) для нержавіючої сталі 08Х18Н10Т за результатами моделювання та за результатами випробувань

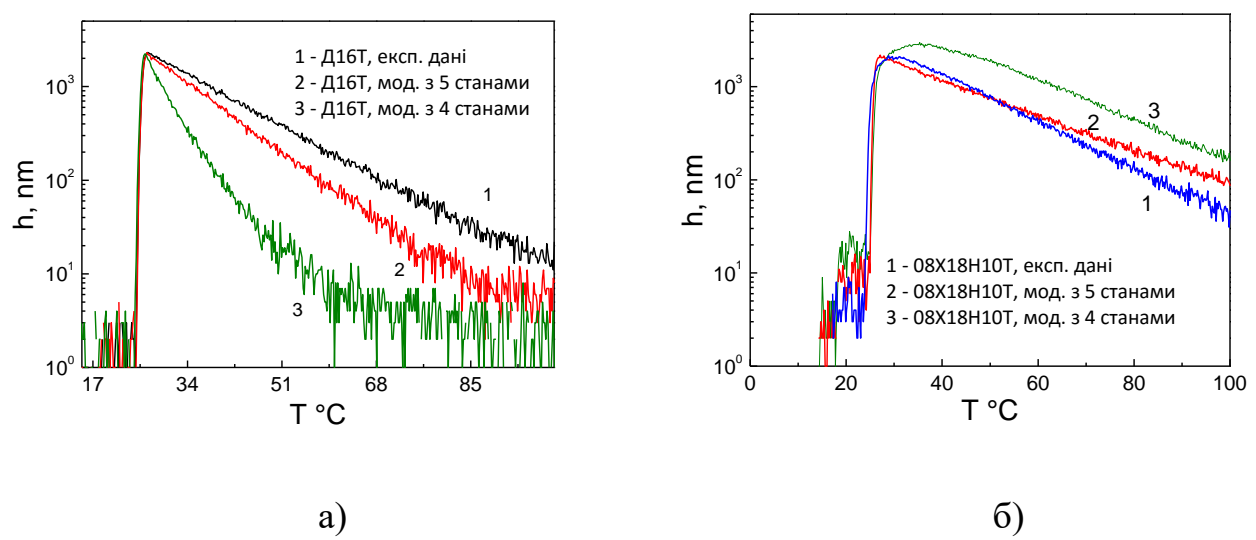


Рис. 10. Залежність середньої глибини пітинга від температури, а) для зразків сплаву Д16Т та б) для нержавіючої сталі 08Х18Н10Т за результатами моделювання та за результатами випробувань

Для досліджуваних матеріалів видно, що при 25-30 $^{\circ}\text{C}$ відбувається різке збільшення глибини пітингів, що при подальшому підвищенні температури плавно зростає.

Четвертий розділ присвячено застосуванню розроблених у дисертації моделі та методів моделювання процесів розвитку пітингоподібних дефектів та їхній практичній реалізації.

Проведена порівняльна оцінка характеристик корозійної стійкості сплавів Д16Т та 08Х18Н10Т за результатами прискорених випробувань та методом моделювання із застосуванням КА. При дослідженнях проводився контроль наступних параметрів: швидкості пітингової корозії, глибини пітингових пошкоджень та втрат механічних властивостей. Також була досліджена корозійна стійкість сплавів в залежності від їх структури. Для обраних сплавів характерним є утворення пітингів на поверхні, що у подальшому може призводити до розвитку міжкристалітної корозії. Даний вид

корозійного руйнування є особливо небезпечним, через те, що не піддається виявленню методом візуального контролю.

Випробування зразків показали, що на початкових стадіях натурно-прискорених випробувань (із квітня по червень) із нанесенням морської солі швидкість корозії зростає найбільш інтенсивно. А з липня по вересень у найбільш посушливі місяці, коли відбувається максимальне випаровування вологої плівки розчину, швидкість корозії помітно падає. Надалі зміна її швидкості є несуттєвою. Після випробувань протягом 3 та 6 місяців для зразків, що експонувались без нанесення морської солі, на перших двох етапах динаміка швидкості корозії змінювалась схожим чином, як і для зразків з нанесенням розчину морської солі, однак ці зміни менше виражені.

Швидкість корозії із часом знижується. Даний процес обумовлений утворенням шару продуктів корозії на поверхні зразка, який перешкоджає доступу кисню. При натурно-прискорених випробуваннях, площа корозійних уражень уже після 3 місяців, складає до 95% (діаметр скупчень пошкоджень доходить до 10 мм) із утворенням щільного шару продуктів корозії. Після випробувань без додаткового нанесення розчину морської солі на протязі 1-го року, площа корозійних пошкоджень складає близько 50% від поверхні із набагато меншим діаметром вогнищ корозії (≤ 1 мм), тобто поверхня залишається більш доступною для дії корозійно-активних компонентів, в результаті чого швидкість корозії продовжує збільшуватись. Таким чином при натурно-прискорених випробуваннях протягом року експозиції швидкість корозії сплаву досягає максимального значення, яке згодом знижується, а у подальшому змінюється незначним чином. Завдяки моделюванню із застосування методу коміркових автоматів тривалість досліджень можна скоротити у десятки разів та отримати результати на протязі однієї доби.

При порівнянні діаграм для реальних випробувань та для моделювання видно, що симуляція методом коміркових автоматів забезпечує відтворення результатів прогнозування глибини пітингоподібних уражень близьких до реальних (рис. 11 та (рис. 12).

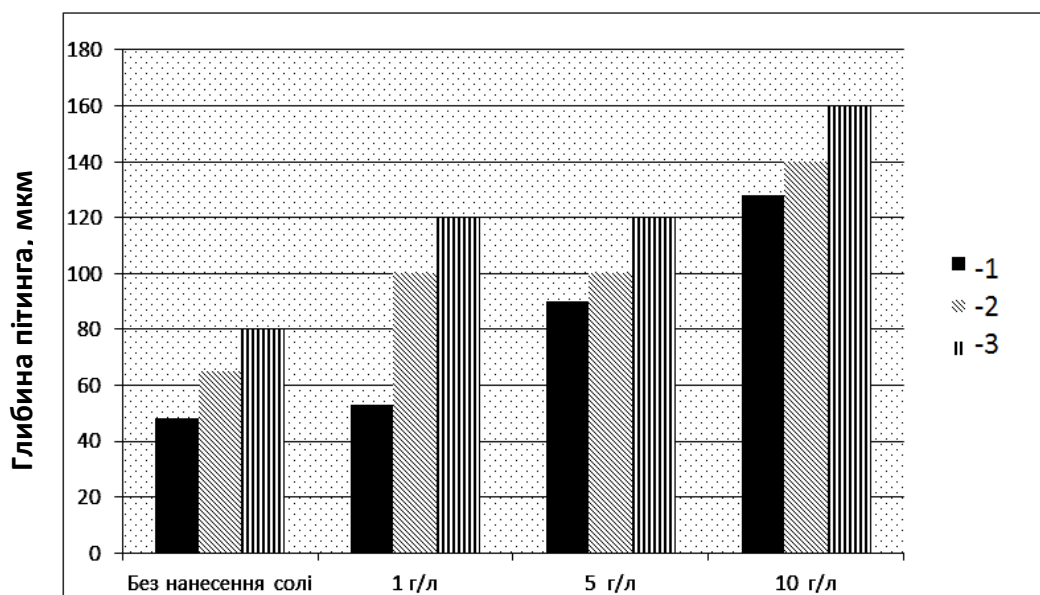


Рис. 11. Середня глибина пітингів на зразках сплаву Д16Т, у результаті моделювання відомим методом (1), запропонованим (2) і після натурно-прискорених випробувань (3) протягом 3-х місяців із нанесенням та без нанесення соляного розчину

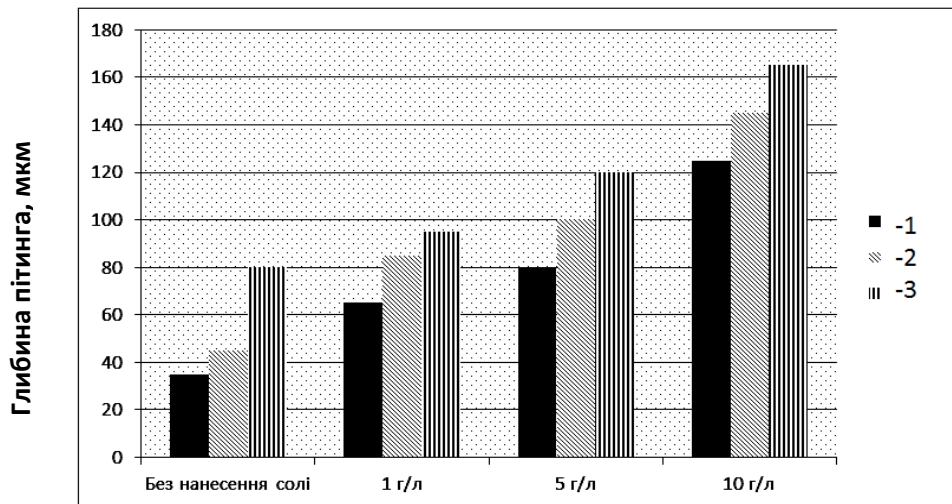


Рис. 12. Середня глибина пітингів на зразках сплаву 08X18N10T, у результаті моделювання відомим методом (1), запропонованим (2) і після натурно-прискорених випробувань (3) протягом 3-х місяців із нанесенням та без нанесення соляного розчину

Порівняння результатів проводилось на основі даних, отриманих не лише методом візуалізації, а й при порівнянні реальної катодно-анодної поляризаційної кривої, побудованої для нержавіючої сталі 08X18N10T, у середовищі 3% NaCl за кімнатної температури (рис. 13).

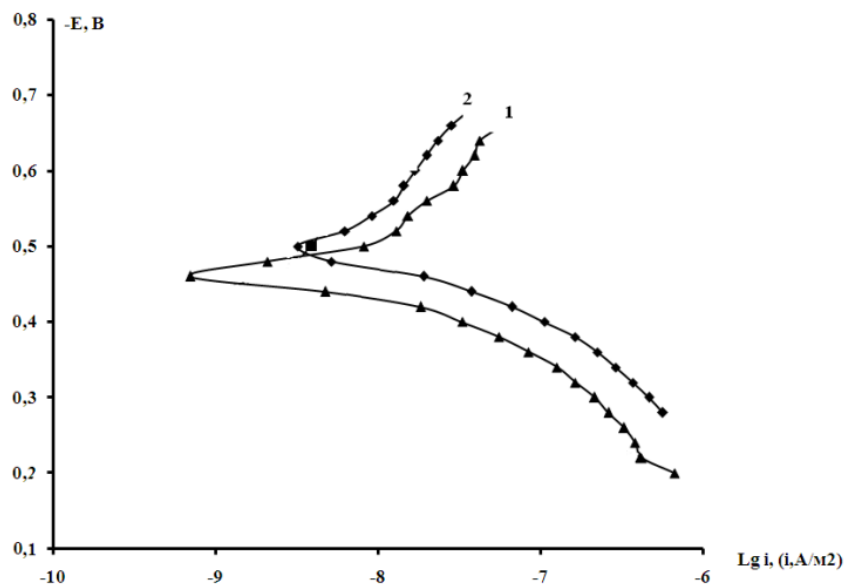


Рис. 13. Катодно-анодна поляризаційна крива для нержавіючої сталі 08X18N10T, у середовищі 3% NaCl за кімнатної температури, побудована із використанням даних, отриманих в ході випробувань (1) та отримана в ході процедури симуляції (2)

Як видно із даного графіка – потенціал корозії у випадку знімання кривої для зразка 08X18N10T рівний 0,45 В, а у випадку теоретичного прогнозування – 0,5 В. Таким чином можна стверджувати, що різниця у 0,05 В є незначною, що підтверджує непогане узгодження результатів симуляції із результатами випробувань.

Для того, щоб дослідити поведінку коміркового автомата, було проведено чотири серії актів симуляції, кожна з яких складалась із 50-ти актів симуляції. Згідно отриманих результатів, характер розвитку дефектів у ході моделювання відрізнявся для різних варіантів задання кількості потенційних дефектів – відмінними були форми змодельованих пітингів та їхнє розташування на поверхні, після завершення процедури

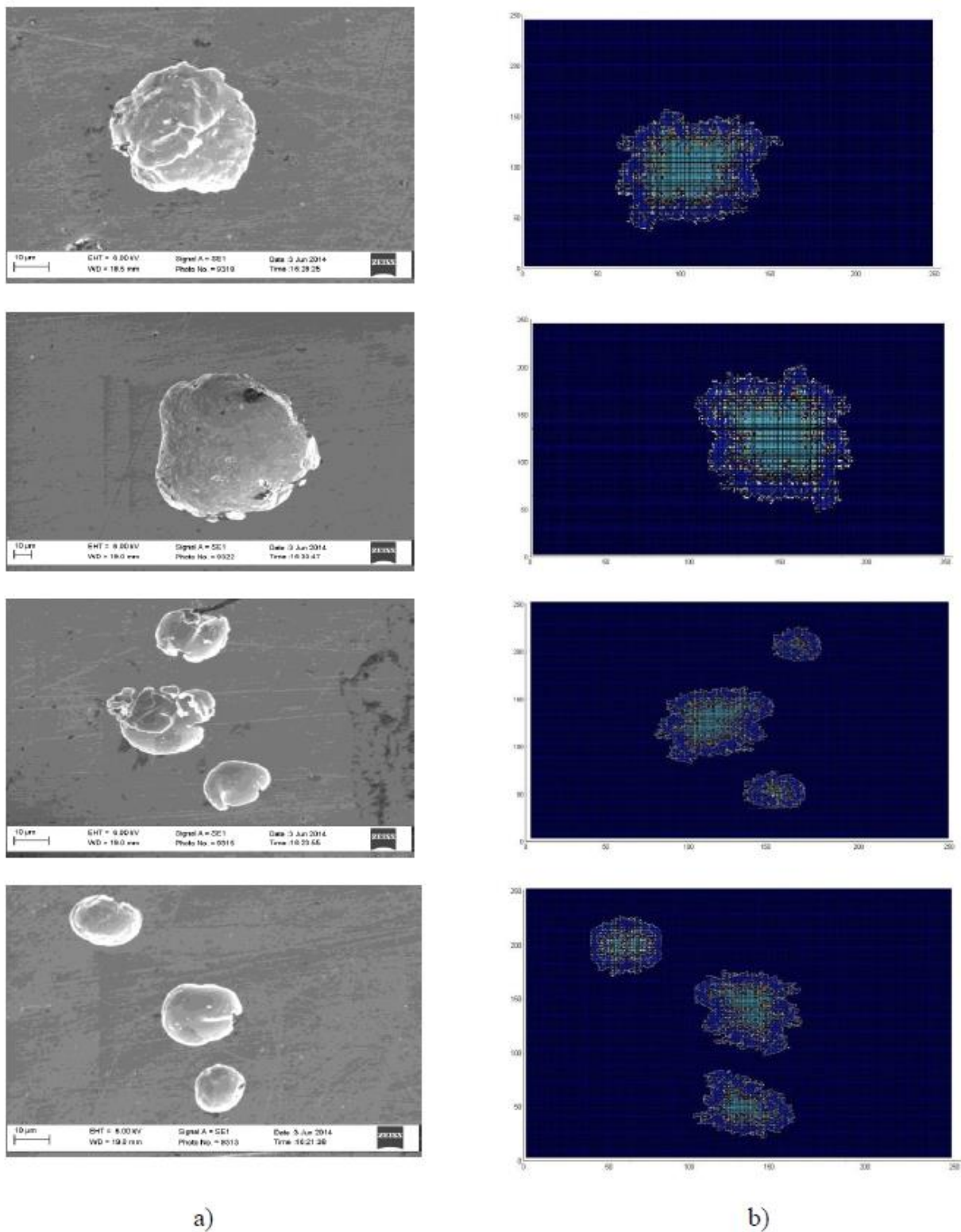
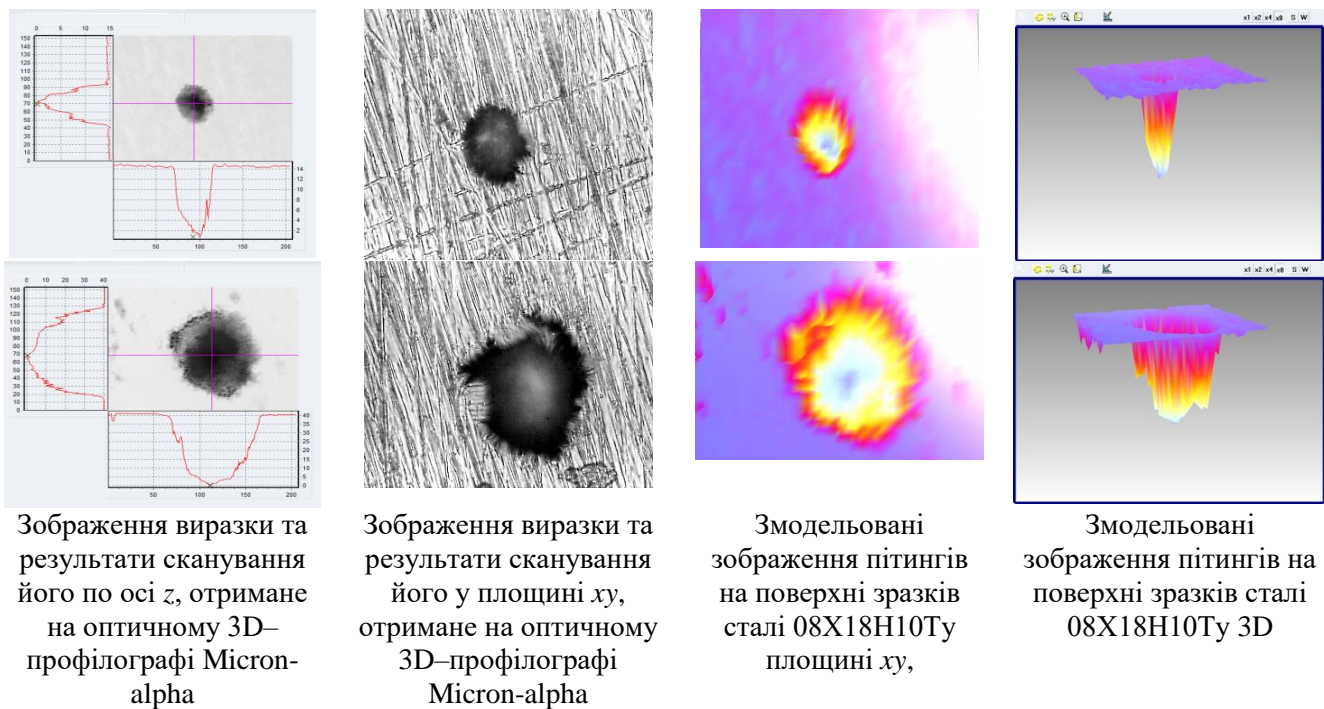


Рис. 14. Зображення реальних (а), отриманих із використанням скануючого електронного мікроскопа EVO 40XVP із системою мікроаналізу INCA Energy та змодельованих у пакеті MATLAB дефектів(б)

симуляції. На рис. 14 відповідно, представлені зображення реальних (а) та змодельованих (б) дефектів. Значення показника рН для усіх випадків було однаковим і становило 7.

При аналізі даних зображень видно, що імовірне розташування дефекту на поверхні зразка та на ґратці коміркового автомата при симуляції добре узгоджується, як



Зображення виразки та результати сканування його по осі z, отримане на оптичному 3D-профілографі Micron-alpha

Зображення виразки та результати сканування його у площині xy, отримане на оптичному 3D-профілографі Micron-alpha

Змодельовані зображення пітингів на поверхні зразків сталі 08X18H10Tu площині xy,

Змодельовані зображення пітингів на поверхні зразків сталі 08X18H10Tu 3D

Рис. 15. Змодельовані зображення пітингів на поверхні зразків сталі 08X18H10T

і їхня приблизна форма, навіть тоді, коли розглядається не одиничний, а декілька дефектів.

При порівнянні залежностей для реальних випробувань та для моделювання видно, що результати, отримані при використанні методу коміркових автоматів узгоджуються із результатами випробувань.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено актуальне наукове завдання побудови та реалізації математичних моделей розвитку пітингоподібних дефектів методом коміркових автоматів на металічних поверхнях, що має важливе значення у задачах технічної діагностики матеріалів та конструкцій для підвищення ефективності відтворення процесу поверхневої корозії.

1. Розроблено нову математичну модель розвитку пітингоподібних дефектів методом коміркових автоматів, яка дає можливість прогнозувати діаметр та глибину дефектів у залежності від таких початкових умов, як агресивне середовище, температура та тривалість перебігу корозії та підвищити точність відтворення фізики процесів.

2. Удосконалено метод коміркових автоматів для реконструкції імовірних пітингоподібних пошкоджень на поверхнях металів та сплавів, у якому на відміну від відомих, враховується імовірність переходу у стан репасивації окремо взятих дефектів, а симуляція розвитку пітинга здійснюється при умові, що пробій пасивної плівки на поверхні зразка заданий в центрі решітки коміркового автомата перед початком відтворення процесу корозії.

3. Апроксимовано експериментальні дані параметрів дефектів за допомогою імовірнісних моделей, залежно від їхніх характеристик, що дало можливість знизити часові затрати та підвищити точність визначення глибини дефекту, особливо для пітингів неправильної форми, що забезпечується декомпозицією складного процесу корозії на елементарні процеси.

4. Запропоновано та обґрунтовано нові локальні правила переходу між сусідніми комітками автомата та використання околу фон Неймана II-го порядку, що дає змогу підвищити точність відтворення реальних фізичних процесів у середньому на 8%, порівняно із вже існуючими скінченних елементів та Монте-Карло.

5. Вдосконалено процес переходу коміркового автомата із імітації одного етапу розвитку пітинга до наступного та симуляцію росту пітингоподібних пошкоджень, шляхом врахування імовірності переходу поверхневого дефекту до етапу репасивації, що дозволило підвищити точність моделювання в середньому на 15% в порівнянні із існуючими методами.

6. Розроблено прикладне програмне забезпечення для реалізації математичних моделей розвитку пітингоподібних пошкоджень методом коміркових автоматів, яке дає змогу розраховувати числові дані про характеристики пітингової корозії та здійснювати візуалізацію зображення найбільш імовірних дефектів. Адекватність отриманих результатів показана шляхом зіставлення з експериментальними даними.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЙНОЇ РОБОТИ

1. Rusyn B. Application of the cellular automata for obtaining pitting images during simulation process of their growth / B. Rusyn, R. Tors'ka, M. Kobasyar // *Advances in Intelligent Systems and Computing*. – Springer-Verlag. – 2013. – Vol. 242. – P. 299–306, ISBN: 978-3-319-02308-3 (Scopus).
2. Kosarevych R. Ya. Modeling of the propagation of pitting corrosion by point processes / R. Ya. Kosarevych, B. P. Rusyn, R. V. Tors'ka // *Materials Science*. – 2016. – Vol. 51, №5. – P. 673 – 681, ISSN: 1068-820X (Web of Science, Scopus).
3. Rusyn B. P. Modeling of the evolution of corrosion pitting with the use of cellular automata / B. P. Rusyn, R. V. Tors'ka, A. Yu. Pokhmurs'kyi // *Materials Science*. – 2015. – Vol. 50, №5. – P. 706–713, ISSN: 1068-820X (Web of Science, Scopus).
4. Rusyn B. Accuracy estimate of modeling of pitting corrosion using cellular automata / B. Rusyn, R. Tors'ka // *Logistyka*. – Poland, 2014. – Vol. 6. – P. 9241–9246, ISSN: 1231–5478.
5. Rusyn B. Cellular automata simulations of single pit similar defects and their clusters / B. Rusyn, R. Tors'ka, B. Kuzminska-Solsnia // *Logistyka*. – Poland, 2015. – Vol. 4. – P. 5547–5550, ISSN: 1231–5478.
6. Торська Р. В. Аналіз методів опису 3D-зображень пітінгів моделями графів / Торська Р. В., Русин Б. П. // *Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка»*. – Донецьк, 2012. – №16 (204). – С. 101–108, ISSN: 1996-1588.
7. Tors'ka R. Application of the cellular automata method to simulation of multiple pit similar defects / R. Tors'ka, B. Rusyn, R. Kosarevych // *Advances in Computer Science Research*. – Atlantis Press, 2015. – Vol. 7, №1. – P. 25–28, ISSN: 2352-538x.
8. Rusyn B. Application the cellular automata method to simulation the laboratory experiments on the stability of duraluminium alloys to pitting corrosion / B. Rusyn, R. Tors'ka // *Present Day Trends of Innovations*. – Lomza, Poland, 2014. – P. 222–229, ISBN: 978-80-260-6150-2.
9. Rusyn B. Overview of recognizing and modeling techniques of pitting images with use graph-based approach / B. Rusyn, R. Tors'ka // *Computer Technologies in Science, Technology and Education*. – Radom, Poland, 2011. – P. 189–200, ISBN: 978-83-73-51-499-7, 978-83-7789-094-3.

10. Rusyn B. Corrosion pit shapes classification / B. Rusyn, R. Tors`ka // Present Day Trends of Innovations. – Lomza, Poland, 2012. – P. 230–237, ISBN: 978-83-60571-23-1.
11. Пат. 99736 Україна, МПК G01N17/00. Спосіб підвищення точності моделювання пітингової корозії на металічних поверхнях із використанням коміркових автоматів / Б.П. Русин, Р.В. Торська. – № 201412025; заявл. 06.11.2014; опубл. 25.06.2015, Бюл. №12. – 4 с.
12. Tors`ka R. Application the cellular automata method for modeling the growth of surfaces corrosion defects / Roxana Tors`ka, Bohdan Rusyn // Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science: Proc. Of the Inter. Conf. TCSET`2016. – L`viv–Slavs`ke, 2016. – P. 145 –148, ISBN: 978-6-1760-7807-4.
13. Торська Р. В. Моделювання пітингоподібних дефектів на металічних поверхнях із застосуванням методу коміркових автоматів / Р. В. Торська, Б. П. Русин // Корозія-2014: Матер. XII міжнародної конференції «Проблеми корозії та протикорозійного захисту конструкційних матеріалів». – Львів, 2014. – С. 119–122, ISSN: 0430-6252.
14. Торська Р. В. Застосування коміркових автоматів для моделювання динаміки розвитку пітингоподібних пошкоджень на поверхнях матеріалів та сплавів / Р. В. Торська // КМН-2013: Матер. XXIII відкритої наук.-тех. конф. молодих науковців і спеціалістів Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка НАН України. – Львів, 2013. – С. 334–337, ISBN: 966-02-2574-1, 978-966-02-6986-6.
15. Торська Р. В. Порівняння результатів моделювання процесу розвитку пітингів із застосуванням методу коміркових автоматів із результатами прискорених випробувань / Р. В. Торська // КМН-2015: Матер. XXIV відкритої наук.-тех. конф. молодих науковців і спеціалістів Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка НАН України. – Львів, 2015. – С. 257–260, ISBN: 966-02-2574-1, 978-966-02-7722-9.
16. Торська Р. В. Опис 3D-моделей об'єктів скелетними графами / Торська Р. В. // Збірник матеріалів IV науково-практичної конференції «Електроніка та інформаційні технології». – Львів–Чинадієво, 2012. – С. 72–73.

АНОТАЦІЇ

Торська Р. В. Математичне моделювання розвитку пітингоподібних дефектів методом коміркових автоматів. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Національний університет «Львівська політехніка» Міністерства освіти і науки України, Львів, 2017.

Дисертація присвячена підвищенню продуктивності процесу прогнозування швидкості пітингової корозії на поверхні металів та сплавів за рахунок розроблення нових математичних моделей та удосконалення методів симуляції росту пітингоподібних дефектів. Для досягнення поставленої мети запропоновано підхід на базі коміркових автоматів із використанням околу комірки фон Неймана II-го порядку, що дало змогу знизити часові затрати та підвищити точність визначення глибини дефекту, особливо для пітингів неправильної форми.

Розроблено математичну модель, що відображає перехід від активного розчинення металу на поверхні до стадії метастабільного росту пітинга з врахуванням імовірності його переходу у пасивний стан. З використанням розробленої математичної моделі, удосконалено метод задання локальних правил переходу для коміркового автомата, що враховує анодні реакції, процеси дифузії, пасивації, репасивації, які відбуваються при пітинговій корозії. Результати дослідження полягають у порівнянні

даних, отриманих шляхом моделювання із реальними даними про динаміку розвитку точкових пошкоджень на поверхні зразків. Практично підтверджена доцільність застосування запропонованого методу симуляції для моделювання процесів кородування сталей у нейтральних середовищах. Точність відтворення фізики процесів на мікро-рівні забезпечується врахуванням електрохімічних факторів, що беруть участь у формуванні досліджуваних дефектів.

Ключові слова: метод коміркових автоматів, математичне моделювання, симуляція, пітингова корозія, пітингоподібний дефект.

Торская Р. В. Математическое моделирование развития питингообразных дефектов методом клеточных автоматов. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и вычислительные методы. – Национальный университет «Львівська політехніка» Министерства образования и науки Украины, Львов, 2017.

Диссертация посвящена повышению производительности процесса прогнозирования скорости питтинговой коррозии на поверхности металлов и сплавов путём разработки новых математических моделей и усовершенствования методов симуляции роста питтингообразных дефектов. Для достижения поставленной цели предложено подход на базе клеточных автоматов с использованием окрестности ячейки фон Неймана II-го порядка, что дало возможность снизить временные затраты и повысить точность определения глубины дефекта, особенно для питтинга неправильной формы.

Разработана математическая модель, отражающая переход от активного растворения металла на поверхности к стадии метастабильного роста питтинга с учетом вероятности его перехода в пассивное состояние. С использованием разработанной математической модели, усовершенствован метод задания локальных правил перехода для клеточного автомата, учитывающий анодные реакции, процессы диффузии, пассивации, репассивации, которые происходят при питтинговой коррозии. Результаты исследования заключаются в сравнении данных, полученных путем моделирования с реальными данными о динамике развития точечных повреждений на поверхности образцов. Практически подтверждена целесообразность применения предложенного метода симуляции для моделирования процессов корродирования сталей в нейтральных средах. Точность воспроизведения физики процессов на микро- уровне обеспечивается учетом электрохимических факторов, участвующих в формировании изучаемых дефектов.

Ключевые слова: метод клеточных автоматов, математическое моделирование, симуляция, питтинговая коррозия, питтингообразный дефект.

Torska R. V. Mathematical modelling of the evolution pit similar defects on the basis of a method using cellular automata. – On the rights of manuscript.

Thesis for a candidate's degree in technical sciences by speciality 01.05.02 – Mathematical Modelling and Methods of Calculation. – Lviv Polytechnic National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Lviv, 2017.

The thesis is dedicated to increasing the performance speed of the forecasting process pitting on the surface of metals and alloys by developing new mathematical models and simulation methods of improving growth pit similar defects. To achieve this goal prompted an approach based on cellular automata with a neighborhood cell von Neumann II-nd order,

which made it possible to reduce time costs and improve the accuracy of determining the depth of the defect, especially for irregularly shaped pitting.

The mathematical model that reflects the transition from the dissolution of the active metal on the surface of the stage of growth of the metastable pitting against the likelihood of its transition to the passive state.

Using the developed mathematical models, improved method of specifying the local transition rules for a cellular automaton, taking into account the anodic reaction, diffusion processes, passivation, repassivation that occur by pitting corrosion.

Results of the study was to compare the data obtained by simulation with real data about the dynamics of the point of damage to the sample surface. Almost confirmed the feasibility of the proposed method simulation to simulate the corrosion of steel processes in neutral environments. Fidelity to the micro-level processes is provided taking into account the physics of electrochemical factors involved in the formation of the studied defects.

It is discovered that the simulated defects correspond (by their shapes and parameters) to the defects obtained by the method of rapid tests under the laboratory conditions. By using the proposed method of simulation, is possible to predict the formation of pit like defects of not only the open type but also of a partly closed type and get the surface topography of the bottom.

This becomes possible because the nature of formation of these defects is explained by different thicknesses and strength characteristics of the oxide films formed on the surfaces and by the acidity of corrosive media. These and other factors can easily be taken into account within the proposed model. Hence, it is worth noting that the possibility of simulation of hidden pits is also quite promising. However, their investigation under the actual conditions is difficult due to the restriction imposed by the methods of microscopy and profilometry (contact and contactless).

According to the obtained results, the character of the evolution of defects in the course of simulation strongly depends on the initial conditions and, hence, the shapes of simulated pits and the pH values on the surfaces of the cavities were different at the end of simulation.

Key words: cellular automata method, mathematical modelling, simulation, pitting corrosion, pit similar defect.

Підписано до друку 22.02.2017.
Формат 60x84/16. Гарнітура Times.
Ум. друк. арк. 0,9. Друк. цифровий.
Зам. №41. Наклад 100 прим.

Друк ПП «Видавництво «БОНА».
79060, вул. Наукова, 5, м. Львів.
Свідоцтво держ. реєстру ДК №4275.
Тел. (032) 254-02-74