

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

**Навчально-науковий інститут матеріалознавства
та зварювання ім. Є.О. Патона**

Кафедра фізичного матеріалознавства та термічної обробки

До захисту допущено:

Завідувач кафедри

_____ Мирослав КАРПЕЦЬ

«__» _____ 2026 р.

Дипломна робота

**на здобуття ступеня бакалавра за освітньо-професійною програмою
«Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві»
спеціальності 132 «Матеріалознавство»**

**на тему: «Вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації
сплавів на основі алюмінію»**

Виконав:

Здобувач ВО ІV курсу, групи ФМ-21

Зінковський Даниїл Юрійович _____

Керівник:

д.т.н., професор, Доній Олександр Миколайович _____

Консультант з розділу охорони праці:

зав. каф., д.т.н., професор Левченко О. Г. _____

Консультант з економічно-організаційного розділу

доцент, к.е.н., доцент Нараєвський С. В. _____

Консультант з питань нормоконтролю:

ст. в. Шаповалова Н.А. _____

Рецензент:

д.т.н., професор, Мініцький Анатолій В'ячеславович _____

Засвідчую, що у цій дипломній роботі немає
запозичень з праць
інших авторів без відповідних посилань.
Здобувач ВО _____

Київ – 2026 року

**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Навчально-науковий інститут матеріалознавства
та зварювання ім. Є.О. Патона
Кафедра фізичного матеріалознавства та термічної обробки**

Рівень вищої освіти – перший (бакалаврський)

Спеціальність – 132 «Матеріалознавство»

Освітньо-професійна програма «Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Мирослав КАРПЕЦЬ

«___» _____ 2026 р.

ЗАВДАННЯ

на дипломну роботу студенту

Зіньковського Даниїла Юрійовича

1. Тема роботи «Вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації сплавів на основі алюмінію», керівник роботи Доній Олександр Миколайович, д.т.н., професор, затверджені наказом по університету від «28» 05 2026 р. №1986с
2. Термін подання студентом роботи _____
3. Вихідні дані до роботи: параметри модельних систем алюмінієвих сплавів Al-Cu, Al-Mg, Al-Si, діапазон швидкостей охолодження 0,5–8,5 К/с, результати комп'ютерного імітаційного моделювання на базі клітинних автоматів, дані переддипломної практики.
4. Зміст роботи: літературний огляд; матеріали та методика досліджень; результати та їх обговорення; економічна частина; охорона праці.
5. Перелік ілюстративного матеріалу (із зазначенням плакатів, презентацій тощо): 82 сторінок, 15 таблиць, 31 рисунок, 9 формул, 38 літературних джерел.

6. Консультанти розділів роботи *

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Організаційно економічна частина	Нараєвський С.В. доцент		
Охорона праці	Левченко О.Г. зав. каф., професор		
Нормоконтроль	Шаповалова Н.А. ст. в.		

7. Дата видачі завдання 20.04.2026

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання дипломної роботи	Термін виконання етапів роботи	Примітка
1	Видача завдання, розробка плану	20.04.2026	виконав
2	Аналіз літератури та теорії моделювання	27.04.2026	виконав
3	Опанування методики імітаційного моделювання	04.05.2026	виконав
4	Проведення досліджень, збір результатів	11.05.2026	виконав
5	Аналіз результатів та написання розділів	30.05.2026	виконав
	Оформлення роботи за вимогами ДСТУ	28.05.2026	виконав
6	Попередній захист роботи	05.06.2026	виконав
7	Захист перед екзаменаційною комісією	16.06.2026	

Здобувач ВО

Даниїл ЗІНЬКОВСЬКИЙ

Керівник

Олександр ДОНІЙ

РЕФЕРАТ

Дипломна робота складає: 82 сторінок, 31 рисунок, 15 таблиць, 38 джерел.

АЛЮМІНІЄВІ СПЛАВИ, ГАРЯЧІ ТРІЩИНИ, ЗАРОДКОУТВОРЕННЯ, ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, КЛІТИННІ АВТОМАТИ, КРИСТАЛІЗАЦІЯ МАКРОСТРУКТУРА, ШВИДКІСТЬ ОХОЛОДЖЕННЯ.

Об'єкт дослідження: процес зародкоутворення та росту твердої фази в бінарних металевих розплавах на основі алюмінію

Предмет дослідження: особливості кінетики формування центрів кристалізації та макроструктури в системах Al-Cu, Al-Mg та Al-Si залежно від інтенсивності зовнішнього тепловідводу

Мета роботи: встановлення кінетичних параметрів кристалізації вказаних алюмінієвих сплавів у діапазоні швидкостей охолодження (0,5–8,5) К/с із застосуванням методів комп'ютерного імітаційного моделювання

Методи дослідження: комп'ютерне імітаційне моделювання на базі клітинних автоматів, синергетичний підхід до опису нерівноважних процесів, термічний аналіз віртуальних кривих охолодження

Результати дослідження та їх новизна: Доведено лінійну залежність між швидкістю охолодження та кількістю центрів твердої фази. Вперше проаналізовано феномен первинного кінетичного стрибка як точки біфуркації переохолодженого розплаву. Обґрунтовано термодинамічний механізм утворення гарячих тріщин у широкоінтервальних сплавах (Al-Cu, Al-Mg) на противагу стійкій евтектиці Al-Si.

Сфера застосування: металургія, ливарне виробництво, розробка технологій предиктивного керування якістю та дефектостійкістю високотехнологічних виливків з алюмінієвих сплавів

ABSTRACT

The diploma work consists of: 82 pages, 31 figures, 15 tables, 38 sources.

ALUMINUM ALLOYS, AUTOMATA, CELLULAR NUCLEATION, COOLING RATE, CRYSTALLIZATION, HOT TEARING, MACROSTRUCTURE, SIMULATION MODELING

Object of research: the process of nucleation and growth of the solid phase in binary aluminum-based metal melts

Subject of research: kinetic regularities of the formation of crystallization centers and macrostructure in Al-Cu, Al-Mg, and Al-Si systems depending on the intensity of external heat removal

Purpose of the work: establishing the regularities of crystallization kinetics of these aluminum alloys in the cooling rate range of (0.5–8.5) K/s using computer simulation modeling

Research methods: computer simulation modeling based on cellular automata, a synergetic approach to describing non-equilibrium processes, thermal analysis of virtual cooling curves

Research results and their novelty: A linear relationship between the cooling rate and the number of solid phase centers is proven. For the first time, the primary kinetic jump phenomenon is analyzed as a bifurcation point of the melt. The thermodynamic mechanism of hot tearing in wide-interval alloys (Al-Cu, Al-Mg) is substantiated as opposed to the stable Al-Si eutectic

Field of application: metallurgy, foundry, development of technologies for predictive quality control and defect resistance of high-tech aluminum alloy castings

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	8
ВСТУП.....	9
1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....	10
1.1 Особливості кристалізації сплавів.....	10
1.2 Комп'ютерне моделювання кристалізації сплавів	13
1.2.1 Обмеження класичних методів та перехід до імітації.....	14
1.2.2 Клітинні автомати та синергетичний підхід.....	15
1.2.3 Математичне ядро моделювання сплавів.....	17
1.2.4 Структура та функціональні можливості програмного комплексу	18
1.3 Основні положення теорії кристалізації.....	22
1.4 Висновки до розділу 1.....	24
2. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕННЯ.....	26
2.1 Налаштування імітаційної моделі утворення структури твердого металу при кристалізації для проведення комп'ютерного експерименту	26
2.2 Методика проведення комп'ютерних експериментів.....	29
2.3 Висновки до розділу 2.....	32
3. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ ДАНИХ	34
3.1 Порівняльний аналіз кінетики кристалізації сплавів Al-Cu, Al-Mg та Al-Si	34
3.1.1 Порівняння мікроструктур сформованих злитків.....	34
3.1.2 Аналіз термічних кривих охолодження.....	38
3.1.3 Дослідження динаміки зародкоутворення та феномену температурного стрибка.....	41
3.2 Вплив швидкості охолодження на дисперсність макроструктури сплавів	45
3.3 Висновки до розділу 3.....	49
4. ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА.....	51
4.1 Науково-технічна актуальність НДР	51

4.2 Розрахунок витрат на проведення НДР.....	52
4.2.1 Витрати на оплату праці.....	52
4.2.2 Єдиний соціальний внесок.....	54
4.2.3 Матеріали, необхідні для проведення досліджень.....	54
4.2.4 Енергоносії для проведення досліджень	54
4.2.5 Витрати на спеціальне обладнання та послуги сторонніх організацій	55
4.2.6 Інші прямі невраховані витрати	55
4.2.7 Накладні витрати	55
4.2.8 Розроблення планової калькуляції кошторисної вартості теми	56
4.3 Науково-технічна ефективність НДР	57
4.4 Висновки до розділу 4.....	59
5. ОХОРОНА ПРАЦІ.....	60
5.1 Характеристика об'єкта та умови його експлуатації.....	60
5.2 Оцінка небезпечних і шкідливих виробничих факторів	62
5.3 Вимоги безпеки під час виконання моделювання на ПК.....	65
5.4 Мікроклімат робочої зони та його вплив на організм	67
5.5 Вплив шуму та випромінювання монітора на дослідників.....	68
5.6 Ергономіка робочого місця та режими праці і відпочинку	69
5.7 Розрахунок системи штучного освітлення комп'ютерної лабораторії.....	70
5.8 Заходи забезпечення охорони праці	73
5.9 Висновки до розділу 5.....	75
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ.....	76
GENERAL CONCLUSIONS.....	78
СПИСОК ДЖЕРЕЛ.....	80

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

T – поточна температура, К;

T_k – теоретична температура кристалізації, К;

ΔT – величина термічного переохолодження розплаву, К;

$\Delta T_{\max 1}$ – максимальне переохолодження для швидкості утворення центрів, К;

$\Delta T_{\max 2}$ – максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів, К;

α – коефіцієнт тепловіддачі, Вт/(м²·К);

$V_{\text{охол}}$ – швидкість охолодження розплаву, К/с;

$R_{\text{кр}}$ – критичний радіус зародка твердої фази, м;

a – коефіцієнт температуропровідності металу, м²/с;

W – швидкість поширення фронту кристалізації (хвилі перемикання), м/с;

c – питома теплоємність, Дж/(кг·К);

λ – коефіцієнт теплопровідності, Вт/(м·К);

ρ – густина матеріалу, кг/м³;

τ – крок системного часу, с.

ВСТУП

Алюмінієві сплави систем Al-Cu, Al-Mg та Al-Si мають широке використання у сучасному аерокосмічному та автомобільному виробництві. Зазначені матеріали є базовою основою для створення більшості конструкційних деталей. Завдяки високій питомій міцності та відмінним ливарним характеристикам, ці сплави дозволяють суттєво зменшити загальну масу виробів при збереженні їхньої високої надійності під дією експлуатаційних навантажень [1].

Головним викликом при роботі з цими системами є висока схильність широкоінтервальних сплавів до утворення дефектів у вигляді гарячих тріщин. Подібно до IT-сфери, де натурні випробування замінюються віртуальними тестами, у матеріалознавстві на зміну методу «спроб і помилок» приходять імітаційне комп'ютерне моделювання. Важливою перевагою підходу є можливість налаштовувати кінетику кристалізації через зміну швидкості охолодження, що надає змогу адаптувати структуру під специфічні технічні вимоги [2].

Іншим прикладом сучасного підходу в цій галузі є використання синергетичних моделей та клітинних автоматів для аналізу нерівноважних процесів у розплаві. На відміну від класичних розрахунків, імітаційні алгоритми фіксують кінетичні зміни безпосередньо на мікрорівні. При комп'ютерному моделюванні з'являється перевага у вигляді фіксації первинного кінетичного стрибка нуклеації та точок біфуркації розплаву. Впровадження такого аналізу значно зменшує енергоспоживання, час та фінансові витрати на реальному виробництві [3].

РОЗДІЛ 1

ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Особливості кристалізації сплавів

Сучасне матеріалознавство та промислове виробництво металевих конструкцій неможливо уявити без широкого використання легких сплавів, серед яких абсолютно домінуючу позицію займають матеріали на основі алюмінію [1]. Серед усього різноманіття алюмінієвих сплавів основною базою як для теоретичних металургійних досліджень, так і для масового практичного застосування виступають класичні подвійні (бінарні) системи, зокрема алюміній-мідь (Al-Cu), алюміній-магній (Al-Mg) та алюміній-кремній (Al-Si) [1, 2]. Висока актуальність та безпрецедентна поширеність цих систем у світовій промисловості пояснюється насамперед тим, що вони слугують основною матрицею для створення переважної більшості складних багатокомпонентних промислових сплавів (як деформованих, так і ливарних) [2]. Як правило, у реальному виробництві до цих базових систем цілеспрямовано додаються додаткові легуючі елементи, модифікатори та мікродобавки, що дозволяє тонко регулювати кінцевий комплекс експлуатаційних характеристик [1].

Сфера застосування матеріалів на основі згаданих систем охоплює найбільш високотехнологічні та критично важливі галузі: від аерокосмічного машинобудування та сучасного автомобілебудування до суднобудування і виробництва складної електроніки [3]. Кожна з цих систем формує свій унікальний тип мікроструктури під час фазового переходу з рідкого у твердий стан, що в кінцевому підсумку повністю визначає їхні механічні, технологічні та корозійні властивості [2, 3]. Таким чином, глибоке розуміння термодинамічних процесів та особливостей макроструктурування, що відбуваються саме в цих базових системах, є ключем до створення новітніх конструкційних матеріалів високої надійності [4].

Розглядаючи специфіку формування мікроструктури, слід зазначити, що сплави систем алюміній-мідь (Al-Cu) та алюміній-магній (Al-Mg) при робочих концентраціях легуючих елементів (зокрема, близько 4,5% для міді та 6% для магнію) кристалізуються з утворенням структури однорідного твердого розчину [5, 6]. Ця структурна особливість забезпечує матеріалам ряд суттєвих експлуатаційних переваг. Серед головних «плюсів» цих систем варто виділити високі показники питомої міцності, відмінну здатність до подальшого термічного зміцнення (особливо для сплавів з міддю), високу пластичність та малу питому вагу, що робить їх незамінними у навантажених конструкціях, де критично важливою є мінімізація загальної маси виробу [1, 5].

Проте, поряд із безперечними перевагами, дані системи мають і ряд специфічних технологічних недоліків, що значно ускладнює процес отримання якісних литих заготовок. Головною і найбільш небезпечною проблемою сплавів Al-Cu та Al-Mg є їхня висока схильність до утворення гарячих тріщин під час кристалізації [7]. З фізико-металургійної точки зору ця вада зумовлена тим, що зазначені системи належать до класу так званих широкоінтервальних сплавів [2, 7]. Для них характерним є надзвичайно великий температурний інтервал кристалізації – тобто значна різниця між температурами ліквідусу (початку утворення твердої фази) та солідусу (повного завершення фазового переходу) [7]. Внаслідок цього розтягнутого переходу в об'ємі злитка протягом тривалого часу існує двофазна твердо-рідка зона. Лінійна усадка та внутрішні напруження, що неминуче виникають у жорсткому каркасі зрослих кристалів на пізніх етапах охолодження, не можуть бути компенсовані припливом рідкого розплаву, оскільки міждендритні канали виявляються перекритими [3, 7]. Це призводить до макроскопічних розривів незміцнілої структури ще за високих температур, утворюючи гарячі тріщини – критичний дефект, який є головною перешкодою для отримання якісного лиття з цих сплавів [7].

Принципово інший механізм структуроутворення та технологічну поведінку демонструє система алюміній-кремній (Al-Si). Хоча на діаграмі стану при мінімальних концентраціях кремнію передбачено існування області чистого твердого розчину, при робочому вмісті легуючого елемента (зокрема, до 8% Si), як і в переважній більшості сучасних промислових ливарних сплавів (силумінів), обов'язковою і визначальною складовою мікроструктури є евтектика [6, 8] типовий вигляд діаграми стану якої наведено на рисунку 1.1.

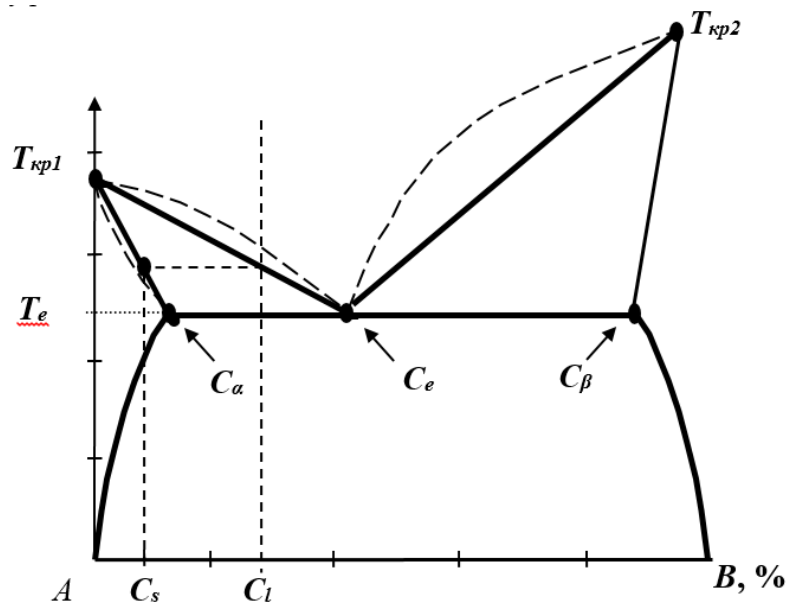


Рисунок 1.1 – Типова діаграма стану системи з евтектичним перетворенням (на прикладі Al-Si) [4]

Наявність евтектичного перетворення кардинально змінює теплофізичні та технологічні властивості матеріалу. Головною основною перевагою формування евтектики є суттєве зниження температур плавлення сплаву – як температури ліквідусу, так і солідусу [3, 8]. На відміну від широкоінтервальних твердих розчинів, евтектичні сплави кристалізуються у вузькому температурному діапазоні або взагалі при ізотермічній зупинці [3]. Зниження температур ліквідусу і солідусу забезпечує розплаву комплексну технологічну перевагу: він набуває

надзвичайно високої рідкоплинності, що дозволяє заповнювати найскладніші ливарні форми, характеризується концентрованою усадкою та, що є найбільш критичним фактором, демонструє надзвичайно високу стійкість до утворення гарячих тріщин [7, 8]. Саме ці унікальні властивості зробили систему Al-Si абсолютною основою для сучасного фасонного лиття деталей будь-якої складності [8].

Незважаючи на глибоке теоретичне розуміння природи дефектоутворення, зокрема проблеми виникнення гарячих тріщин у широкоінтервальних сплавах, традиційні емпіричні методи (так званий метод «спроб і помилок») вдосконалення ливарних технологій сьогодні практично вичерпали свою ефективність [4]. Класичні натурні експерименти є надзвичайно ресурсоемними, тривалими в часі та, головне, не дають змоги детально дослідити мікроскопічну кінетику фазового переходу в режимі реального часу [9, 10].

Для того, щоб цілеспрямовано розвивати нові металургійні технології, ефективно покращувати фізико-механічні властивості наявних сплавів та гарантовано зменшувати вплив їхніх природних недоліків, необхідно проводити глибокі предиктивні дослідження [4, 9]. З огляду на це, на сучасному етапі розвитку науки про матеріали критичною необхідністю є вихід на застосування сучасного комп'ютерного моделювання [10]. Використання методів імітаційного моделювання виступає одним із найпотужніших та найточніших інструментів сьогодення, що дозволяє віртуально відтворити динаміку структуроутворення, проаналізувати температурні поля та спрогнозувати ймовірність утворення дефектів ще на стадії проектування, відкриваючи шлях до створення бездефектних литих деталей [4, 10].

1.2 Комп'ютерне моделювання кристалізації сплавів

Перехід від теоретичного опису основ кристалізації до розробки конкретних технологічних рішень у сучасному матеріалознавстві неможливий без залучення

потужного математичного апарату та цифрових інструментів аналізу [4, 11]. Комп'ютерне моделювання виступає зв'язуючою ланкою між абстрактними фізичними законами та реальним процесом формування структури у виливку [12]. Враховуючи високу складність та нелінійність фазових перетворень у багатокомпонентних системах, традиційні розрахункові методи сьогодні доповнюються або повністю замінюються імітаційними моделями [9, 13]. У даному підрозділі розглядаються обмеження класичних математичних підходів, обґрунтовується вибір синергетичної парадигми як найбільш адекватної для дослідження нерівноважних процесів, а також детально описується архітектура та функціональні можливості програмного комплексу, використаного в роботі для дослідження сплавів систем Al-Cu, Al-Mg та Al-Si [4, 6].

1.2.1 Обмеження класичних методів та перехід до імітації

Класичний підхід до аналізу процесу формування полікристалічної структури металів та сплавів традиційно базується на розв'язанні задачі Стефана [11]. Цей метод передбачає використання диференціальних рівнянь теплопровідності та дифузії з відповідними початковими і граничними умовами для опису руху фронту кристалізації [11, 12]. Однак на практиці застосування виключно аналітичного математичного апарату для опису реального макроструктурування стикається з нездоланими труднощами. Якщо в переохолодженому розплаві виникає хоча б сотня центрів кристалізації, математична постановка задачі миттєво виростає до сотень пов'язаних рівнянь у частинних похідних [12]. Ситуація додатково ускладнюється необхідністю врахування механічної взаємодії зростаючих зерен та локальної зміни концентрації компонентів у міждендритних просторах на пізніх етапах фазового переходу [7, 12]. Загальна система рівнянь стає настільки громіздкою, що її точне розв'язання виявляється практично неможливим [11].

У зв'язку з цим сучасне матеріалознавство для дослідження таких багатofакторних процесів перейшло до використання методів системного аналізу, зокрема – імітаційного моделювання [13]. Суть цього підходу полягає в тому, що еволюцію складної термодинамічної системи (розплаву) подають у вигляді алгоритму, який реалізується за допомогою комп'ютерної програми [4, 13]. На відміну від жорстких математичних моделей, імітаційне моделювання базується на блоковому принципі. Це дозволяє органічно поєднувати строгі диференціальні закони переносу тепла і маси з імовірнісними феноменологічними явищами (тепловими флуктуаціями при зародженні центрів), що робить його найбільш ефективним і надійним інструментом для віртуального дослідження кінетики кристалізації та прогнозування кінцевих властивостей майбутнього виливка [6, 9].

1.2.2 Клітинні автомати та синергетичний підхід

Аналіз формування зародків нової фази та структури металів при кристалізації традиційно проводиться з використанням методів класичної термодинаміки (термостатики) [3, 10]. Цей підхід передбачає рівноважність процесу, сталість переохолодження та оперує макрооб'єктами з нескінченною кількістю елементів [10]. Однак умови, за яких відбувається кристалізація у переважній більшості реальних ливарних і металургійних процесів, є далекими від рівноважних [9, 12]. Зокрема, при високих швидкостях охолодження, характерних для сучасних технологій, переохолодження безперервно змінюється як у просторі, так і в часі [11, 12]. За таких нерівноважних умов застосування суворих термодинамічних принципів стає недостатньо обґрунтованим, оскільки система перебуває в метастабільному стані, а сам процес структуроутворення набуває яскраво вираженого нелінійного характеру з точками біфуркації (втрати стійкості) при утворенні кожного нового зародка [10, 14].

Для подолання цих теоретичних обмежень та створення адекватної комп'ютерної моделі процесу кристалізації на сучасному етапі застосовується синергетичний підхід [14]. У рамках синергетики розплав розглядається не як суцільне класичне середовище, а як розподілене активне (збудливе) середовище, що складається з однотипних елементів, які локально взаємодіють один з одним [10, 14]. Для опису такої системи ідеально підходить математичний апарат клітинних автоматів, зокрема мережі з бістабільних (тригерних) елементів [9, 15]. Кожен такий віртуальний елемент розрахункової сітки може перебувати у двох стаціонарних станах: «1» (рідка фаза) або «0» (тверда фаза) [9].

Відповідно до цієї аналогії, поширення фронту кристалізації моделюється як рух хвилі перемикавання станів (з рідкого у твердий) у бістабільному клітинному автоматі під дією зовнішнього впливу – термічного переохолодження [9, 15] схему якого наведено на рисунку 1.2.

t_1	0	0	0	1	0	0		0	0	1	1	1	0	t_i
	0	0	0	0	0	0		0	0	1	1	1	0	
	0	0	0	0	0	0		0	0	0	1	0	0	
	0	0	0	0	0	0		0	0	0	1	0	0	
	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	
	0	0	0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	
	а						б							
t_k	1	1	1	1	1	1		1	1	1	1	1	1	t_n
	0	1	1	1	1	0		1	1	1	1	1	1	
	0	1	1	1	1	0		1	1	1	1	1	1	
	0	0	1	1	1	0		1	1	1	1	1	1	
	0	0	1	1	0	0		1	1	1	1	1	1	
	0	0	0	1	0	0		1	1	1	1	1	1	
	в						г							

а), б), в), г) – стани кліткового автомата в різні моменти часу t_1 , t_i , t_k , t_n [10]

Рисунок 1.2 – Схема поширення хвилі перемикавання станів у двовимірному активному середовищі клітинного автомата, яке складається з бістабільних елементів

Враховуючи флуктуаційну природу утворення центрів кристалізації та зростання вже існуючих кристалів у реальних сплавах, до алгоритму клітинного автомата обов'язково інтегрується генератор випадкових чисел [6, 13]. Такий імовірнісний підхід дозволяє максимально реалістично відтворити процеси гомогенної нуклеації, коли кожна комірка активного середовища має певну ймовірність змінити свій фазовий стан залежно від локального рівня переохолодження та наявності поблизу вже сформованих твердих сусідів [6, 9].

1.2.3 Математичне ядро моделювання сплавів

Особливої складності комп'ютерне моделювання набуває при переході від чистих металів до багатокомпонентних систем, таких як досліджувані у роботі сплави Al-Cu, Al-Mg та Al-Si [4]. На відміну від кристалізації чистих речовин, де процес контролюється виключно відведенням тепла, структуроутворення у сплавах визначається одночасною дією двох взаємопов'язаних процесів: теплопередачі та дифузійного перерозподілу легуючих елементів [11, 12].

Математичне ядро імітаційної моделі базується на чисельному розв'язанні рівняння теплопровідності Фур'є, яке описує зміну температурного поля системи в часі [11, 16]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + F(x, y, t) \quad (1.1)$$

де додатковий член $F(x, y, t)$ враховує виділення прихованої теплоти кристалізації в тих точках простору, де клітинний автомат зафіксував фазове перетворення [16].

Паралельно з цим, для врахування дифузійних процесів у рідкій фазі, що виникають внаслідок різної розчинності компонентів у твердому та рідкому станах, використовується рівняння Фіка [11, 12]:

$$\frac{\partial K}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K}{\partial y^2} \right) \quad (1.2)$$

Інтеграція цих процесів у єдиний алгоритм дозволяє моделі враховувати «розподільчу дифузію» [6]. Утворення кожної порції твердої фази супроводжується локальним «імпульсом» теплоти та зміною концентрації другого компонента в околі точки кристалізації [6, 11].

Для розрахунку величини переохолодження, яке є основною рушійною силою процесу, модель використовує апроксимовану діаграму стану бінарного сплаву [4]. Через рівняння ліній ліквідусу та солідусу програма на кожному кроці системного часу визначає рівноважну температуру для поточного складу розплаву, що дозволяє коректно моделювати як кристалізацію однорідних твердих розчинів (Al-Cu, Al-Mg), так і складні евтектичні перетворення у системі Al-Si [4, 6]. Такий комплексний підхід забезпечує високу адекватність моделі та дозволяє віртуально досліджувати формування структури за умов, максимально наближених до реального виробництва [4, 13].

1.2.4 Структура та функціональні можливості програмного комплексу

Програмна реалізація імітаційної моделі кристалізації побудована як складний багатоблочний алгоритм, що функціонує за принципом дискретного системного часу [4]. Робота комплексу розпочинається з блоку ініціалізації, де користувач здійснює введення повного масиву початкових даних [17]. До цієї групи параметрів належать теплофізичні характеристики металу (густина, питома

теплоємність, прихована теплота кристалізації), геометричні розміри досліджуваної області, а також граничні умови, що визначають інтенсивність тепловідводу через стінки ливарної форми [4, 18] інтерфейс введення яких продемонстровано на рисунку 1.3.

Редагування даних			
TabSheet1 TabSheet2 TabSheet3			
Початкова температура [K]	1031	Теплота кристалізації	397000
Кінцева температура [K]	940	Коеф. теплопровідності	213
Температура ліворуч	298	Густина	2700
Температура праворуч	298	Час спостереження [s]	0.1
Температура зверху	298	Розмір тіла по X [m]	0.025
Температура знизу	298	Розмір тіла по Y [m]	0.07
Коеф. тепловіддачі ліворуч	310		
Коеф. тепловіддачі праворуч	310		
Коеф. тепловіддачі зверху	310		
Коеф. тепловіддачі знизу	310		
Питома теплоємність	1255		

а)

Редагування даних	
TabSheet1 TabSheet2 TabSheet3	
Темп. кристал. компон. А [K]	933
Концентрація модифікатора [%]	0.2

б)

Редагування даних	
Вкладка 1 Вкладка 2 Вкладка 3	
Інтервал метастаб. для центрів [K]	6
Макс. переохл. для центрів [K]	50
Інтервал метастаб. для росту [K]	0.1
Макс. переохл. для росту [K]	70
Коеф. пропорційності	10500
<input checked="" type="checkbox"/> Врахувати пропорції зразка	
<input type="checkbox"/> Врахувати стінки відливки	

в)

а) вікна введення умов охолодження та теплофізичних властивостей;
 б) параметри стану рідкої фази; в) евристичні параметри моделювання
 Рисунок 1.3 – Параметри імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації чистого металу (Al) [4]

Особливе місце в структурі алгоритму займають евристичні параметри, які визначають внутрішню кінетику фазового перетворення [6]. Зокрема, задаються максимальні значення переохолодження для швидкості утворення центрів кристалізації ($\Delta T_{\max 1}$) та для швидкості росту вже існуючих кристалів ($\Delta T_{\max 2}$) [17]. На основі цих констант програма розраховує ймовірнісні пороги фазового переходу, що дозволяє врахувати флуктуаційну природу нуклеації у розплавах алюмінієвих сплавів [6, 17].

Функціонування моделі на кожному кроці системного часу τ базується на послідовній синхронізації трьох ключових обчислювальних блоків [4, 18]:

Тепловий блок. Чисельне розв'язання рівняння теплопровідності Фур'є з урахуванням локального виділення прихованої теплоти в точках, де відбувся фазовий перехід [19].

Дифузійний блок. Розрахунок розподілу концентрації легуючого елемента (міді, магнію або кремнію) у рідкій фазі на основі рівняння Фіка та апроксимованої діаграми стану [17, 19].

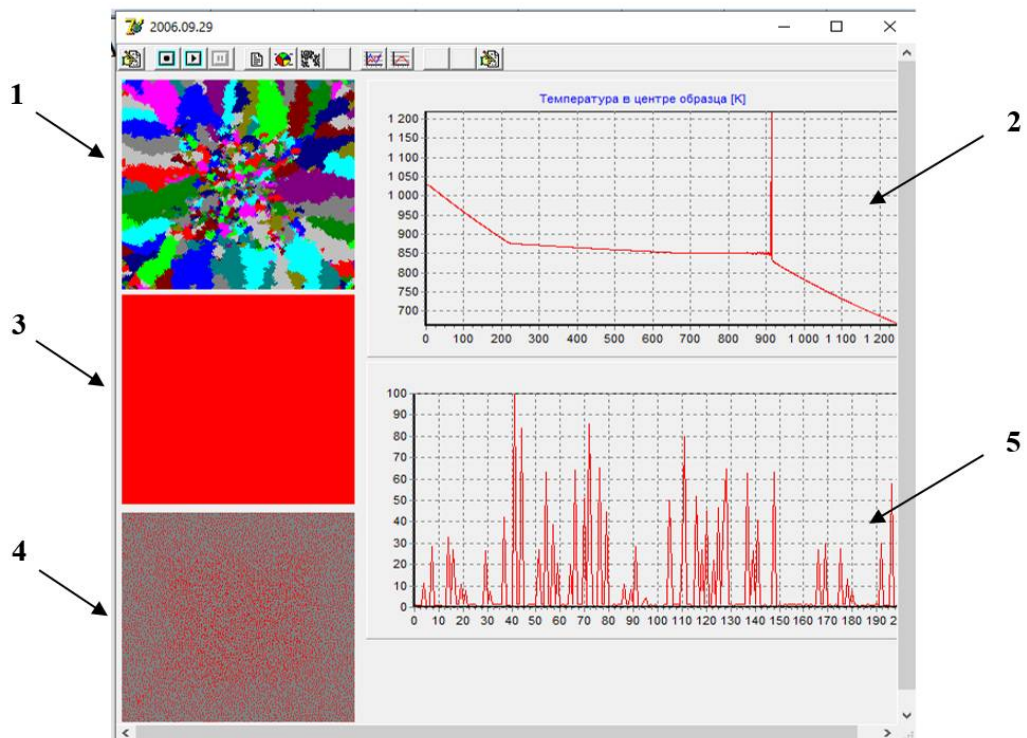
Кінетичний блок. Визначення фактичного локального переохолодження та реалізація імовірнісного алгоритму клітинного автомата для кожної комірки розрахункової сітки [6, 18].

Інтерфейс програмного комплексу (зокрема реалізації «KRISTAL-2») забезпечує комплексну візуалізацію кінетики структуроутворення у реальному часі [17, 18]. Головне вікно програми містить декілька функціональних зон індикації [4] загальний вигляд та елементи яких наведено на рисунку 1.4 на наступній сторінці:

Зона макроструктури. Відображає процес зародження та росту зерен із використанням колірної диференціації для кожного кристала.

Зона термічного аналізу. Виводить змодельовану криву охолодження розплаву.

Зона фазового та концентраційного стану. Демонструє розподіл зон «рідке-тверде», доевтектичний або заевтектичний склад сплаву в кожній точці, а також профіль розподілу легуючого компонента по перерізу системи [4, 17].



1 - вікно, в якому відображається формування структури сплаву; 2 - вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження; 3 - вікно, в якому відображається стан системи в даній точці ("рідке - тверде"); 4 - вікно, в якому відображається доевтектичний або заевтектичний склад сплаву в даній точці; 5 - вікно, в якому відображається розподіл другого компонента по перерізу систем

Рисунок 1.4 – Вихідний інтерфейс імітаційної моделі кристалізації бінарних сплавів [4]

Вихідними даними роботи моделі є цифрові масиви, що автоматично записуються у текстові файли форматів .txt та .dat [4, 18]. Ці дані містять детальну інформацію про зміну температури, сумарну кількість утворених центрів кристалізації та динаміку нарощування об'єму твердої фази [18]. Отримані масиви

інформації є базою для подальшого аналізу та верифікації теоретичних положень, що розглядаються у дипломній роботі [4, 17].

1.3 Основні положення теорії кристалізації

Класичний аналіз формування зародків нової фази та подальшої еволюції мікроструктури металів традиційно базується на основних положеннях термодинаміки [10, 20]. Цей підхід оперує зміною вільної енергії Гіббса та передбачає умови квазірівноважного протікання процесу [21]. Відповідно до класичних уявлень, кристалізація ініціюється при досягненні певного критичного переохолодження ΔT , Коли термодинамічний стимул стає достатнім для подолання енергетичного бар'єра створення нової міжфазної поверхні розділу «рідке-тверде» [20, 22]. При цьому критичний радіус зародка $R_{кр}$, який здатен до подальшого самодовільного росту, у класичній теорії виражається через атомний діаметр a :

$$R_{кр} = a \frac{T_k}{\Delta T} \quad (1.3)$$

де T_k – температура кристалізації,

ΔT – фактичне переохолодження розплаву [10, 11].

Незважаючи на статус базової парадигми, класична термодинамічна модель має суттєві обмеження при описі реальних нерівноважних процесів, що відбуваються в умовах швидкого охолодження [2, 23]. Строгість виразу (1.3) забезпечується виключно за умови, коли переохолодження прямує до нуля ($\Delta T \rightarrow 0$), а розмір зародка стає нескінченно великим ($R_{кр} \rightarrow \infty$) [20, 24]. Проте на практиці кристалізація алюмінієвих сплавів відбувається за значних швидкостей охолодження. Розрахунки для алюмінію ($T_k = 933\text{K}$) показують, що при переохолодженні $\Delta T \approx 0,2T_k$ величина критичного радіуса становить усього

$R_{кр} \approx 3a$ [2, 10]. Це означає, що критичний зародок складається лише з кількох атомів [2]. Оскільки класична термодинаміка була розроблена для опису макроскопічних об'єктів із величезною кількістю елементів ($N \rightarrow \infty$), її автоматичне застосування до таких нанорозмірних угруповань є науково некоректним, оскільки такі об'єкти підпорядковуються законам квантової механіки, а не класичної термостатики [2, 23].

Для вирішення цієї основної суперечності у даній роботі використовується синергетичний підхід до опису нерівноважної кристалізації [2, 23]. З позицій синергетики переохолоджений розплав розглядається як активне дисипативне середовище, а процес структуроутворення – як самоорганізація системи внаслідок втрати стійкості (біфуркації) [10, 23]. У такому трактуванні критичний розмір зародка визначається не через зміну вільних енергій, а через кінетичні характеристики середовища – коефіцієнт температуропровідності a і та швидкість поширення фронту фазового переходу W [2, 24]:

$$R_{кр} = \frac{a}{W} \quad (1.4)$$

де a – коефіцієнт температуропровідності металу (комплексний параметр, що враховує теплопровідність, питому теплоємність та густину),

W – швидкість хвилі перемикання станів клітинного автомата.

Такий підхід дозволяє об'єктивно пов'язати зовнішні параметри охолодження з кінцевою дисперсністю структури, що є вирішальним фактором для адекватного моделювання сплавів систем Al-Cu, Al-Mg та Al-Si за умов інтенсивного тепловідводу [2, 4].

1.4 Висновки до розділу 1

1. На основі проведеного аналізу літературних джерел та сучасного стану проблеми структуроутворення у металевих системах можна зробити висновок, що базові ливарні алюмінієві сплави систем Al-Cu, Al-Mg та Al-Si відіграють ключову роль у сучасному промисловому виробництві [1, 3]. Проте класичні емпіричні методи вдосконалення їхніх властивостей та мінімізації природних недоліків, зокрема схильності до утворення гарячих тріщин у широкоінтервальних сплавах, сьогодні практично вичерпали свою ефективність [7, 25]. Для цілеспрямованої розробки нових ливарних технологій та глибокого вдосконалення існуючих виникає гостра потреба у проведенні подальших детальних досліджень внутрішньої кінетики кристалізації [26, 27].

2. Встановлено, що класичний термодинамічний апарат має суттєві обмеження при описі нерівноважних процесів, оскільки оперує ідеальними макроскопічними категоріями [10, 23]. Тому критично необхідним є використання сучасних методів імітаційного комп'ютерного моделювання на базі синергетичного підходу та теорії клітинних автоматів [4, 9]. Саме цей інструментарій дозволяє віртуально відтворити динаміку зародкоутворення з урахуванням теплових флуктуацій та дифузійних процесів, відкриваючи шлях до предиктивного керування макроструктурою виливків [13, 18].

3. З огляду на актуальність проблеми, метою даної дипломної роботи є дослідження закономірностей кінетики кристалізації та процесів макроструктурування бінарних алюмінієвих сплавів систем Al-Cu, Al-Mg та Al-Si залежно від інтенсивності теплового відводу з використанням методів комп'ютерного імітаційного моделювання.

4. Для досягнення поставленої мети робота передбачає послідовне вирішення низки наукових та прикладних задач. На початковому етапі необхідно здійснити адаптацію та тонке налаштування параметрів імітаційної моделі для

проведення віртуальних експериментів з обраними алюмінієвими сплавами. Наступним кроком є проведення комплексного комп'ютерного моделювання процесу кристалізації у широкому технологічному діапазоні швидкостей зовнішнього охолодження від 0,5 К/с до 8,5 К/с. Особлива увага приділяється дослідженню динаміки зародкоутворення, ефектів виділення прихованої теплоти (рекалесценції) та їх впливу на формування систем, що утворюють тверді розчини, у порівнянні з системами з евтектичним перетворенням. Окрім того, передбачається визначення кількісних характеристик дисперсності сформованих макроструктур та встановлення рівня їх математичної кореляції зі швидкістю охолодження. На завершальному етапі проводиться порівняльний аналіз зафіксованих кінетичних стрибків нуклеації для верифікації існуючих теоретичних синергетичних моделей фазового переходу.

РОЗДІЛ 2

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕННЯ

2.1 Налаштування імітаційної моделі утворення структури твердого металу при кристалізації для проведення комп'ютерного експерименту

Для виконання завдань дипломної роботи застосовувалася комп'ютерна імітаційна модель кристалізації бінарних сплавів [17, 18]. Процес налаштування віртуального середовища складався з послідовного введення комплексу теплофізичних, термодинамічних та геометричних параметрів, які характеризують реальні умови формування макроструктури досліджуваних матеріалів [4]. На першому етапі до алгоритму вводилися теплофізичні характеристики для сплавів систем Al-Si, Al-Cu та Al-Mg. Зокрема, задавалися базові показники теплопровідності, питомої теплоємності, густини та прихованої теплоти кристалізації [28]. Оскільки теплофізичні властивості металів мають різні значення в рідкому та в твердому станах, для проведення обчислень використовувалися їхні усереднені значення для відповідних температурних діапазонів охолодження (таблиця 2.1) [28].

Таблиця 2.1 – Теплофізичні параметри сплавів, які використовувались в комп'ютерних експериментах

Параметри	Al-8%Si	Al-4,5%Cu	Al-6%Mg
Теплопровідність, Вт/(м*К)	94	160	140
Питома теплоємність, Дж/(кг*К)	1180	1100	1200
Густина, кг/м ³	2350	2950	2600
Теплота кристалізації, Дж/кг	190000	260000	360000

Наступним кроком було введення характерних точок діаграм стану кожної з досліджуваних систем [21, 29]. До розрахункового модуля інтегрувалися значення температур початку кристалізації чистих компонентів, температури утворення евтектики, а також показники евтектичної концентрації та граничної розчинності легуючих елементів у твердому розчині (таблиця 2.2) [29].

Таблиця 2.2. – Параметри діаграм стану, які використовувались в комп'ютерних експериментах

Параметри	Al-8%Si	Al-4,5%Cu	Al-6%Mg
Температура кристалізації компонента А, К	933	933	933
Температура кристалізації компонента Б, К	1430	864	451,5
Температура евтектики, К	850	821	723
Концентрація евтектики, %	12,6	71 (33,0)	35,0
Максимальна розчинність компонента А, %	1,65	12,3 (5,7)	17,4
Максимальна розчинність компонента Б, %	100	98,9	35,5

Окремої уваги при підготовці вихідних даних вимагала процедура адаптації термодинамічних параметрів для системи алюміній-мідь [29]. З огляду на те, що реальна діаграма стану цього сплаву відзначається значною складністю (рис. 2.1) через присутність інтерметалідних фаз, для коректного проведення комп'ютерного експерименту її було зведено до еквівалентної квазібінарної моделі.

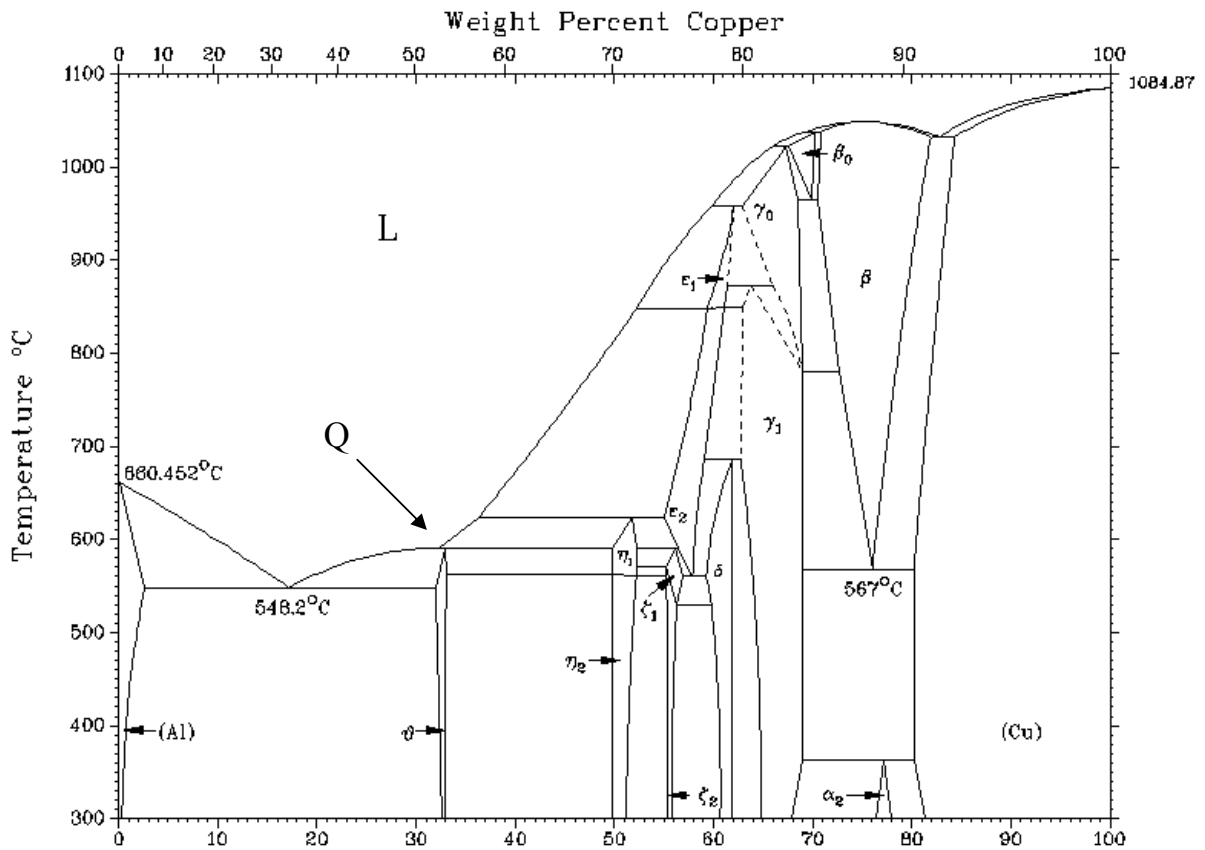


Рисунок 2.1 – Діаграма стану системи Al-Cu [29]

Як ілюструє наведений графік, робочий діапазон концентрацій штучно обмежувався межею утворення хімічної сполуки CuAl_2 , що відповідає вмісту 46,5% міді в основному металі (точка Q на рисунку 2.1). Враховуючи, що в зазначених межах система кристалізується за класичним механізмом обмеженої розчинності з наявністю евтектики, алгоритм програми потребував пропорційного перерахунку хімічного складу. Згідно з цією методикою, гранична концентрація у 46,5% міді приймалася за абсолютний максимум, тобто за стовідсотковий вміст умовного другого компонента, відносно якого розраховувався еквівалентний склад для досліджуваного робочого сплаву системи Al-Cu.

Варто відзначити, що всі критичні температурні точки під час такої трансформації залишалися фактичними та не підлягали змінам. Застосований підхід до створення еквівалентної діаграми дозволив значно розширити

функціональні можливості даної імітаційної моделі, не порушуючи при цьому базових фізичних закономірностей процесу переходу металу з рідкого стану у твердий. Завершальний етап підготовки до комп'ютерного експерименту включав задання геометричних розмірів віртуального зразка та встановлення кроку системного часу, який синхронізував розв'язання рівнянь теплопровідності та дифузії. Додатково налаштовувалися евристичні показники, такі як інтервали метастабільності для утворення нових центрів твердої фази та для росту вже існуючих кристалів. Це дозволило максимально наблизити поведінку клітинного автомата до флуктуаційної природи процесів реального структуроутворення в розплавах на основі алюмінію.

2.2 Методика проведення комп'ютерних експериментів

Важливим етапом будь-якого комп'ютерного моделювання є перевірка адекватності створеної імітаційної моделі, тобто підтвердження того, що віртуальний процес із достатньою точністю відтворює закономірності реального фізичного явища. У контексті даного дослідження головним критерієм адекватності виступав збіг заданих швидкостей охолодження розплаву з результатами, отриманими під час симуляції. Основним інструментом керування тепловим режимом у системі був коефіцієнт тепловіддачі α . У реальних ливарних процесах цей параметр є комплексним і залежить від матеріалу форми, наявності покриттів та умов теплообміну з навколишнім середовищем, тоді як у програмі його зміна дозволяла безпосередньо впливати на інтенсивність відведення тепла від віртуального злитка.

Для забезпечення достовірності отриманих результатів, контроль термічного стану здійснювався за допомогою віртуальної термопари, яка фіксувала зміни температури у центрі змодельованого об'єму матеріалу. Програмний комплекс генерував безперервні криві охолодження у координатах

«температура – час», що дозволяло відстежувати динаміку тепловідведення на всіх етапах переходу металу з рідкого у твердий стан. Аналіз отриманих термограм підтвердив глибоку фізичну адекватність математичної моделі, оскільки на розрахункових кривих чітко відображалися характерні температурні зупинки та зміни кута нахилу, які зумовлені виділенням прихованої теплоти кристалізації під час проходження фазових перетворень. Розрахунок фактичної швидкості охолодження проводився алгоритмом на лінійній ділянці кривої у рідкому стані (до досягнення температури ліквідусу) як відношення зниження температури до відповідного проміжку системного часу. Сама процедура проведення комп'ютерного експерименту полягала у встановленні певних швидкостей охолодження (від 0,5 К/с до 8,5 К/с із кроком 1,0 К/с), однакових для всіх досліджуваних сплавів (Al-8%Si, Al-4,5%Cu, Al-6%Mg). Підбір значень коефіцієнтів тепловіддачі для кожного досліджуваного сплаву відбувався у відповідності до методики, яка описана у [4]. Цей процес вимагав індивідуального підходу, оскільки кожна система характеризується унікальним набором теплофізичних властивостей, зокрема специфічною теплоємністю, теплопровідністю та теплотою кристалізації. Відповідно, для забезпечення однакової швидкості охолодження для різних сплавів було потрібно підібрати коефіцієнти тепловіддачі для кожного з них.

Для підбору коефіцієнтів тепловіддачі виконувались наступні дії. Встановлювали довільну величину коефіцієнта тепловіддачі і починили комп'ютерний експеримент. Після запуску програми починалося моделювання кривої охолодження. На початку кристалізації коли температура на кривій охолодження стає трохи нижчою від приблизної температури ліквідусу, роботу алгоритму зупиняють для фіксації проміжних параметрів, як це продемонстровано на рисунку 2.2 на наступній сторінці.

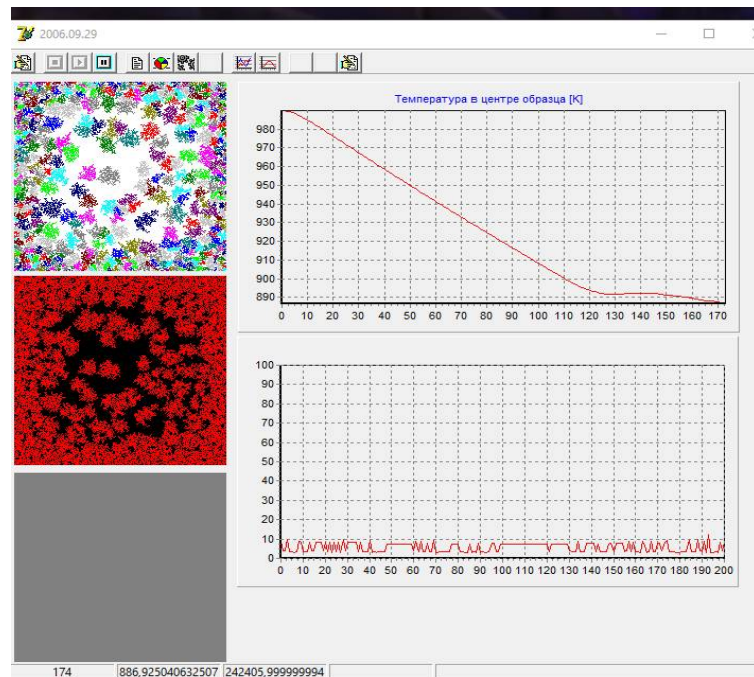


Рисунок 2.2 –Приклад зупинки роботи комп'ютерної програми для розрахунку швидкості охолодження

моделювання зупиняли (рис. 2.2). Потім цю ділянку кривої охолодження зберігали в файлі, який досліджували з допомогою програми «TVGraf 0.0.0006». Розрахунок швидкості охолодження показано на рисунку 2.3.

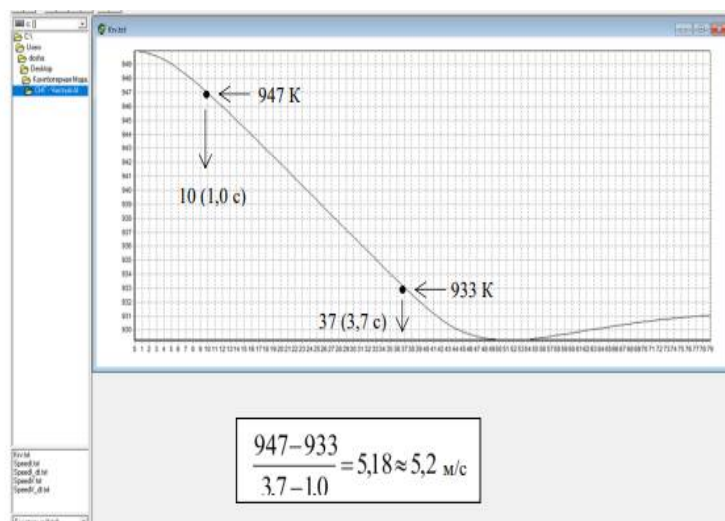


Рисунок 2.3 – Приклад розрахунку швидкості охолодження по змодельованій кривій охолодження

У результаті проведеної серії калібрувальних запусків було сформовано масив узгоджених коефіцієнтів, які гарантують високу точність відтворення температурних умов для всіх подальших етапів дослідження (таблиця 2.3).

Таблиця 2.3. –Значення коефіцієнтів тепловіддачі для забезпечення заданих швидкостей охолодження

Швидкість охолодження ($V_{\text{охол}}$), К/с	α для сплаву Al-8%Si	α для сплаву Al-4,5%Cu (еквівалент)	α для сплаву Al-6%Mg
$V_{\text{охол}} = 0,5$ К/с	14,0	15,6	15,0
$V_{\text{охол}} = 1,5$ К/с	42,5	46,9	45,7
$V_{\text{охол}} = 2,5$ К/с	73,0	78,1	75,0
$V_{\text{охол}} = 3,5$ К/с	101,0	109,4	106,7
$V_{\text{охол}} = 4,5$ К/с	130,0	140,7	140,0
$V_{\text{охол}} = 5,5$ К/с	158,0	172,0	167,7
$V_{\text{охол}} = 6,5$ К/с	176,7	207,0	197,5
$V_{\text{охол}} = 7,5$ К/с	216,3	234,5	228,0
$V_{\text{охол}} = 8,5$ К/с	245,2	265,8	259,2

2.3 Висновки до розділу 2

1. У результаті виконання другого розділу роботи було проведено комплексне методичне та технічне забезпечення для подальшого здійснення комп'ютерного експерименту. На першому етапі було здійснено аналіз та систематизацію вихідних даних для трьох систем алюмінієвих сплавів: Al-8%Si, Al-4,5%Cu та Al-6%Mg. Процес підготовки включав не лише вибір основних теплофізичних констант, таких як теплопровідність, густина та питома теплоємність, а й детальне опрацювання параметрів відповідних діаграм фазової

рівноваги. Особливу увагу було приділено розробці алгоритму адаптації складної системи алюміній-мідь до імітаційної моделі шляхом створення еквівалентної квазібінарної діаграми стану. Такий підхід дозволив нівелювати обмеження програмного комплексу щодо моделювання багатофазних інтерметалідних перетворень, зберігаючи при цьому фізичну достовірність результатів у досліджуваному діапазоні концентрацій.

2. Шляхом проведення серії ітераційних калібрувальних розрахунків було встановлено зв'язок між інтенсивністю зовнішнього тепловідведення та динамікою температури віртуального розплаву. Це дозволило визначити точні значення коефіцієнтів тепловіддачі, які забезпечують отримання стабільних швидкостей охолодження у широкому діапазоні від 0,5 К/с до 8,5 К/с. Отримані дані підтвердили здатність моделі адекватно реагувати на зміну теплових умов.

3. Таким чином, сформована у другому розділі методична база та налаштований інструментарій дозволяють перейти до безпосереднього дослідження закономірностей формування центрів кристалізації. Усі підготовчі етапи, включаючи параметризацію систем та перевірку їхньої термічної стабільності, виконані у повному обсязі, що гарантує високу точність та наукову достовірність подальших результатів моделювання впливу швидкості охолодження на структуру досліджуваних сплавів.

РОЗДІЛ 3

АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ ДАНИХ

3.1 Порівняльний аналіз кінетики кристалізації сплавів Al-Cu, Al-Mg та Al-Si

У даному підрозділі проводиться комплексний порівняльний аналіз процесів макроструктурування під час кристалізації трьох різних систем алюмінієвих сплавів [4, 12]. Головною метою цього етапу є з'ясування того, як природа легуючого елемента (міді, магнію чи кремнію) впливає на внутрішню кінетику фазового переходу за абсолютно однакових умов зовнішнього тепловідводу [18]. Такий підхід дозволяє об'єктивно оцінити термодинамічні бар'єри нуклеації та особливості росту твердої фази як для систем, що утворюють однорідні тверді розчини, так і для систем з евтектичним перетворенням [21, 28].

3.1.1 Порівняння мікроструктур сформованих злитків

Аналіз візуальних результатів комп'ютерного моделювання дозволяє чітко простежити вплив фізико-хімічних констант легуючих елементів на кінцеву дисперсність зеренної будови [28]. Відповідні сформовані мікроструктури трьох досліджуваних злитків, що отримані при фіксованій базовій швидкості охолодження (0,5) К/с, наведено на рисунках 3.1–3.3 на наступній сторінці.

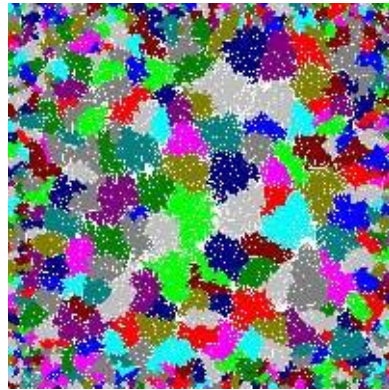


Рисунок 3.1 – Мікроструктура злитка Al-Cu після завершення кристалізації
($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

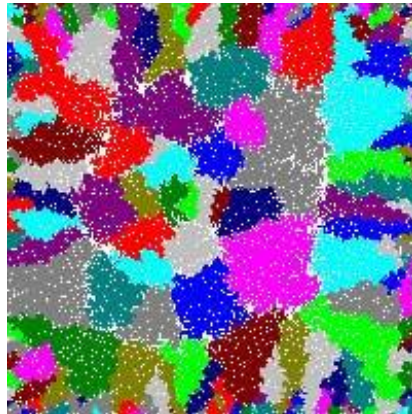


Рисунок 3.2 – Мікроструктура злитка Al-Mg після завершення кристалізації
($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

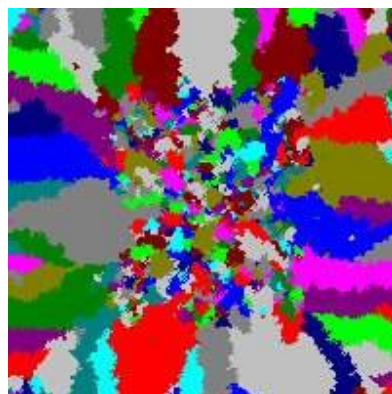
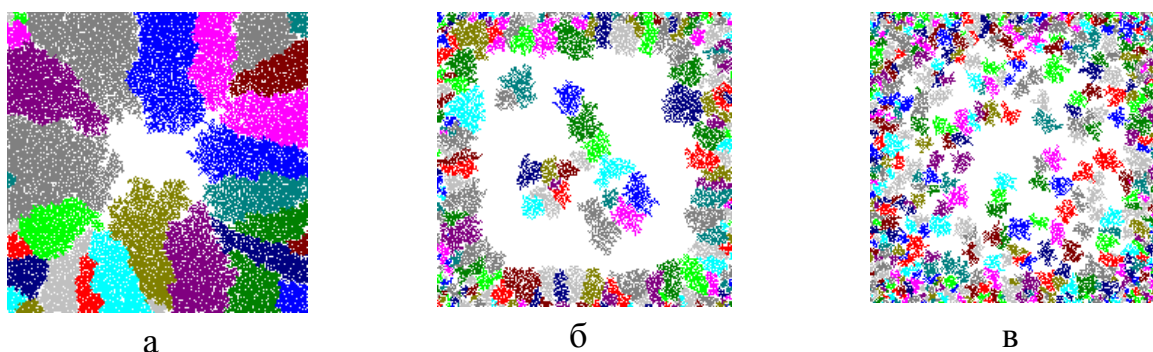


Рисунок 3.3 – Мікроструктура злитка Al-Si після завершення кристалізації
($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

Візуальне та кількісне порівняння отриманих макроструктур підтверджує суттєву різницю в кінетиці зародкоутворення [4]. Сплав системи Al-Cu демонструє формування помірно дисперсної структури однорідного твердого розчину, загальна кількість зерен у якій становить 583 одиниці. Натомість система Al-Mg, незважаючи на аналогічний тип кристалізації (утворення твердого розчину), відзначається значно грубозернистішою будовою – загальна кількість центрів кристалізації тут становить лише 215 одиниць. Така суттєва макроскопічна різниця між двома твердими розчинами зумовлена відмінностями у швидкості виділення прихованої теплоти на ранніх етапах нуклеації, що призводить до швидшого придушення появи нових зародків у сплаві з магнієм [11, 20].

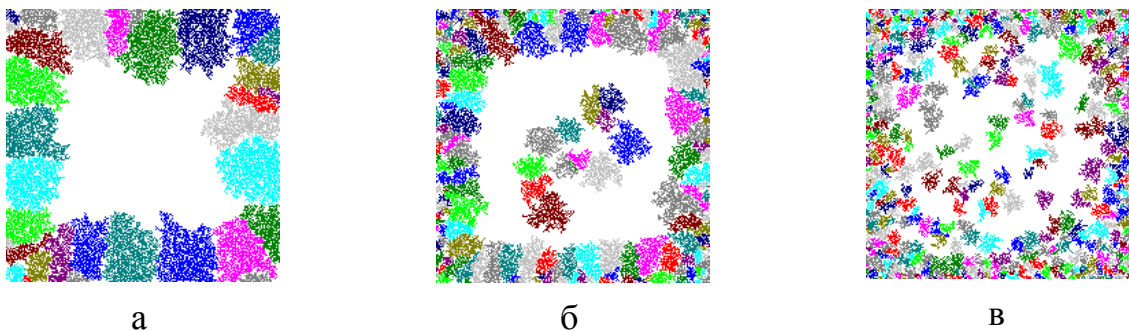
Кардинально іншу морфологію демонструє система Al-Si, яка характеризується наявністю евтектичного перетворення [6]. Цей сплав формує найбільш дисперсну мікроструктуру серед усіх досліджених систем, налічуючи 621 зерно. Однак ключовою візуальною відмінністю структури Al-Si є її виражена гетерогенність: на рисунку 3.3 чітко простежуються як крупні кристали, що утворилися під час первинної хвилі нуклеації та мали достатньо часу для дифузійного росту, так і значна кількість дрібних зерен, які виникли значно пізніше внаслідок специфічного пульсуючого режиму зародкоутворення в переохолодженому розплаві [6, 8].

Важливим аспектом аналізу, який дозволяє здійснити імітаційна модель [4], є можливість візуалізації проміжних («нефінішних») етапів кристалізації та відстеження їх еволюції залежно від інтенсивності тепловідводу. На рисунках 3.4–3.6 представлено стан досліджуваних систем у моменти, коли процес фазового переходу ще не завершився і в центрі зразків зберігається макроскопічна область рідкої фази, для трьох характерних швидкостей охолодження 0,5 К/с, 4,5 К/с та 8,5 К/с.



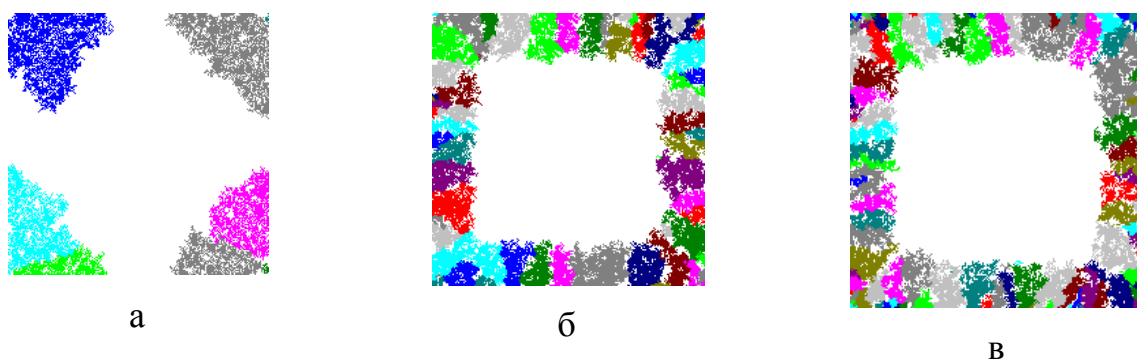
а) 0,5 К/с; б) 4,5 К/с; в) 8,5 К/с

Рисунок 3.4 – Динаміка заповнення об'єму сплаву Al-Cu на проміжному етапі кристалізації при різних швидкостях охолодження



а) 0,5 К/с; б) 4,5 К/с; в) 8,5 К/с

Рисунок 3.5 – Динаміка заповнення об'єму сплаву Al-Mg на проміжному етапі кристалізації при різних швидкостях охолодження



а) 0,5 К/с; б) 4,5 К/с; в) 8,5 К/с

Рисунок 3.6 – Динаміка заповнення об'єму сплаву Al-Si на проміжному етапі кристалізації при різних швидкостях охолодження

Порівняльний аналіз динаміки заповнення об'єму виявляє принципову різницю між системами, яка зберігається на всьому дослідженому діапазоні швидкостей охолодження. Сплави Al-Cu та Al-Mg (рис. 3.4, 3.5) демонструють яскраво виражену схему кристалізації від периферії до центру: тверда фаза інтенсивно формується біля стінок форми, створюючи жорсткий зрощений каркас, у той час як центральна частина злитка залишається рідкою. Враховуючи, що ці системи належать до класу широкоінтервальних сплавів (з великим температурним розривом між ліквідусом і солідусом) [2, 7], така «нещільна» схема макроструктурування та наявність ізольованої рідкої серцевини створюють ідеальні передумови для виникнення значних усадочних напружень [7]. Це дозволяє зробити обґрунтоване припущення, що саме зафіксований моделлю характер фронту кристалізації є ключовим механізмом високої схильності систем Al-Cu та Al-Mg до утворення гарячих тріщин [7, 19].

Натомість система Al-Si (рис. 3.6) демонструє значно вищу щільність та рівномірність заповнення об'єму [8]. Завдяки евтектичній природі перетворення, нові зародки більш рівномірно розподіляються по перерізу, що перешкоджає утворенню великих локальних розривів структури. Таким чином, результати віртуального експерименту наочно підтверджують високу технологічну стійкість алюмінієво-кремнієвих сплавів до дефектоутворення у порівнянні з широкоінтервальними твердими розчинами [6].

3.1.2 Аналіз термічних кривих охолодження

Для поглибленого розуміння термодинаміки фазових перетворень було проведено порівняльний аналіз розрахункових термічних кривих охолодження, згенерованих імітаційною моделлю для кожної з досліджуваних систем [17, 18]. Ці графіки у координатах «температура – час» дозволяють наочно відстежити динаміку відведення тепла та ідентифікувати моменти інтенсивного виділення

прихованої теплоти кристалізації, які порушують монотонність температурної кривої [12, 20]. Відповідні термічні криві охолодження для трьох досліджуваних сплавів, що отримані при фіксованій базовій швидкості (0,5) К/с, наведено на рисунках 3.7–3.9.

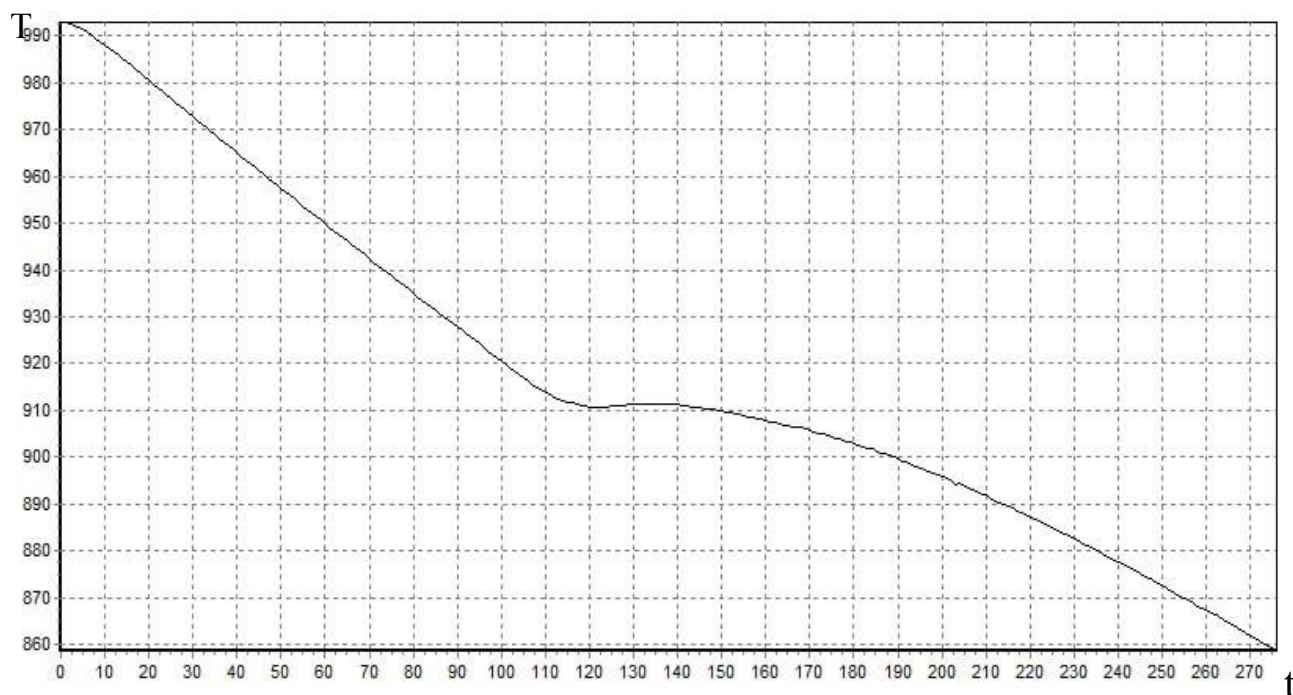


Рисунок 3.7 – Термічна крива охолодження злитка Al-Cu ($V_{\text{охол}} = 0,5$ К/с)

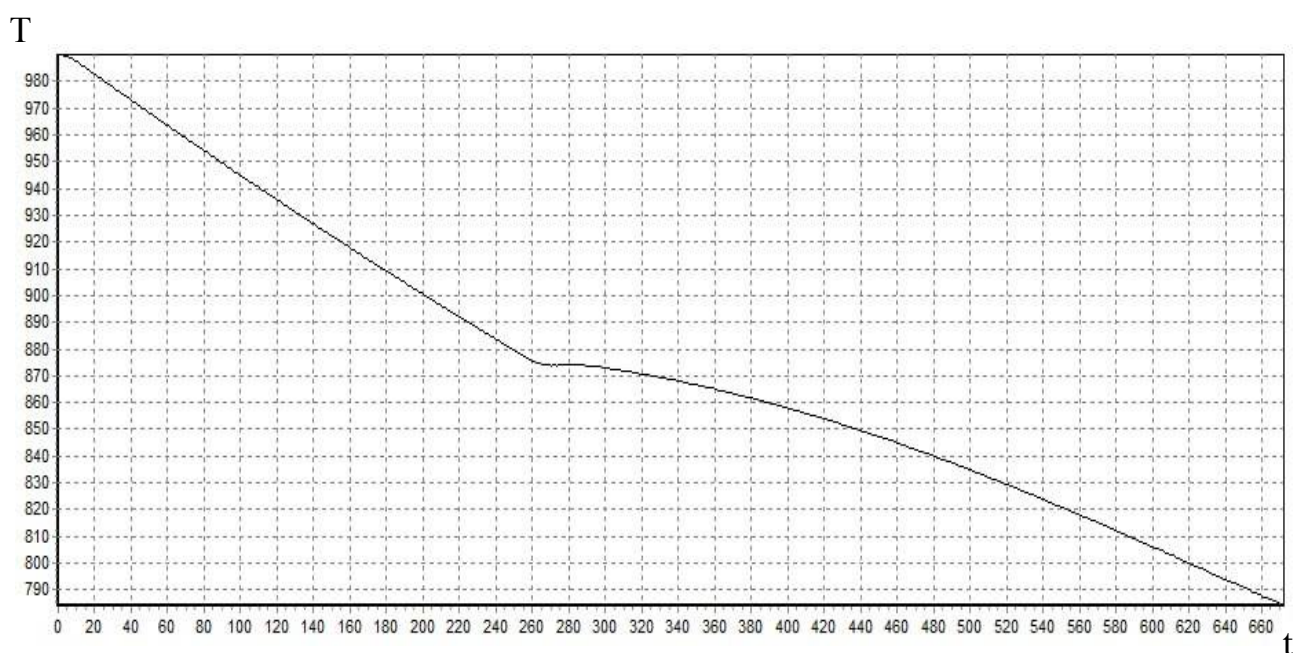


Рисунок 3.8 – Термічна крива охолодження злитка Al-Mg ($V_{\text{охол}} = 0,5$ К/с)

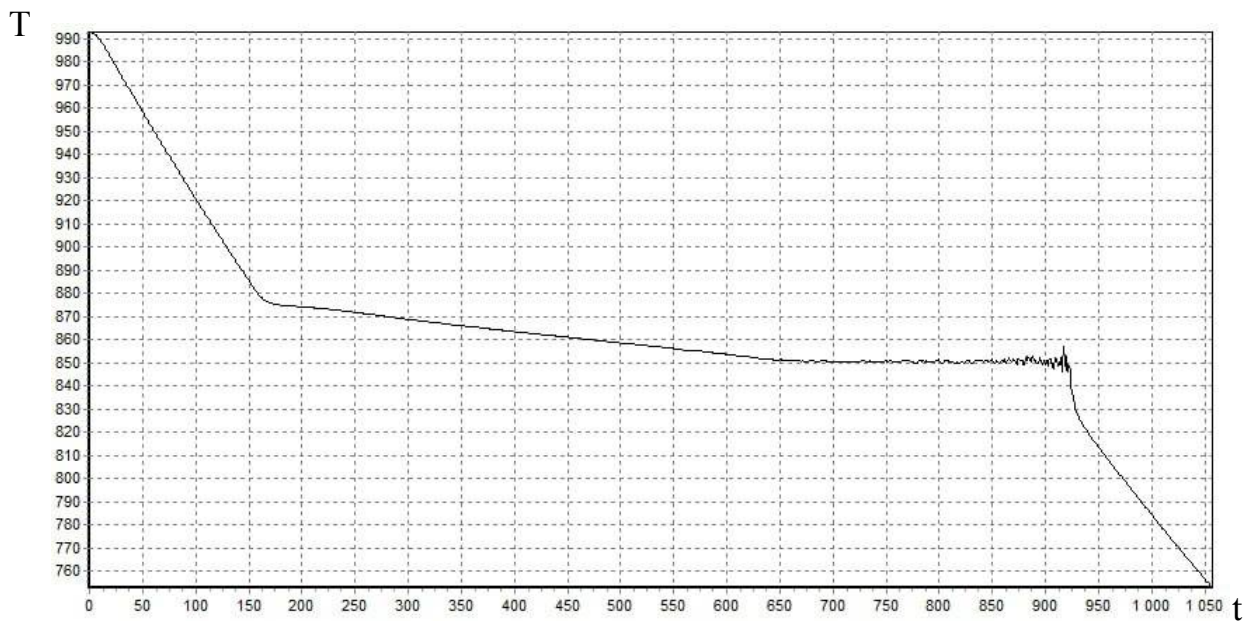


Рисунок 3.9 – Термічна крива охолодження злитка Al-Si ($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

Аналіз представлених термограм підтверджує суттєві відмінності у тепловому балансі досліджуваних систем [24]. Криві охолодження для сплавів Al-Cu та Al-Mg, які формують структуру твердого розчину, мають подібну загальну морфологію: після плавного зниження температури на стадії інкубаційного періоду спостерігається чітко виражений температурний стрибок [21]. Для системи Al-Cu інтенсивне виділення прихованої теплоти кристалізації на стадії вибухової нуклеації призводить до явища рекалесценції, коли температура розплаву самодовільно зростає, досягаючи локального максимуму [12]. Аналогічний, але ще більш стрімкий ефект фіксується на кривій сплаву Al-Mg, де виділення прихованої теплоти кристалізації генерує різкий температурний стрибок (рекалесценцію) від локального мінімуму до максимуму, що миттєво обриває процес подальшого зародкоутворення [24].

Натомість термічна крива охолодження для системи Al-Si має принципово інший вигляд, що зумовлено дифузійним лімітуванням росту твердої фази під час евтектичного перетворення [8]. На графіку (рисунок 3.9) відсутній єдиний потужний пік рекалесценції; натомість спостерігається розтягнута температурна

зупинка (так звана «поличка») [29]. На розрахунковій температурній кривій цей ефект відображається у вигляді численних мікроколивань у діапазоні температур від 851 до 848 К. Такий «шум» на кривій охолодження є прямим фізичним відображенням мікропорційного виділення прихованої теплоти, що супроводжує унікальний пульсуючий режим нуклеації в алюмінієво-кремнієвому розплаві [6, 8].

3.1.3 Дослідження динаміки зародкоутворення та феномену температурного стрибка

Для найбільш глибокого розуміння кінетичних механізмів фазового переходу було проведено детальний аналіз графіків залежності кількості утворених центрів кристалізації від часу [4, 18]. Ці графічні залежності є ключовими індикаторами інтенсивності нуклеації та дозволяють візуалізувати процеси, що відбуваються в розплаві на мікроскопічному рівні під впливом переохолодження. Відповідну динаміку зародкоутворення для трьох досліджуваних систем наведено на рисунках 3.10–3.12.

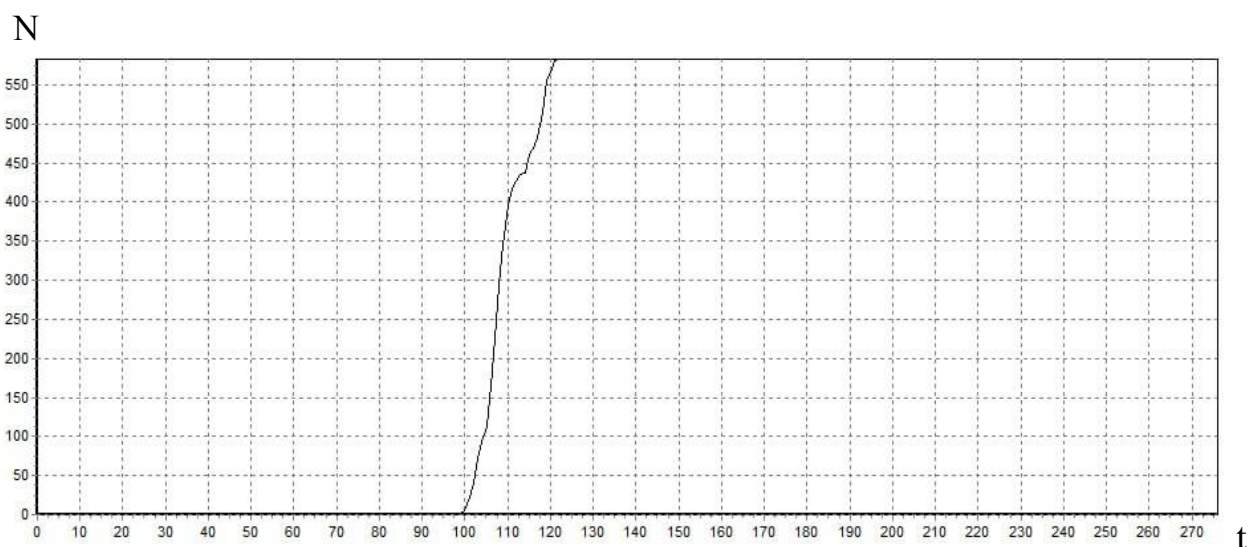


Рисунок 3.10 – Графік кількості центрів кристалізації, що утворилися в Al-Cu
($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

N

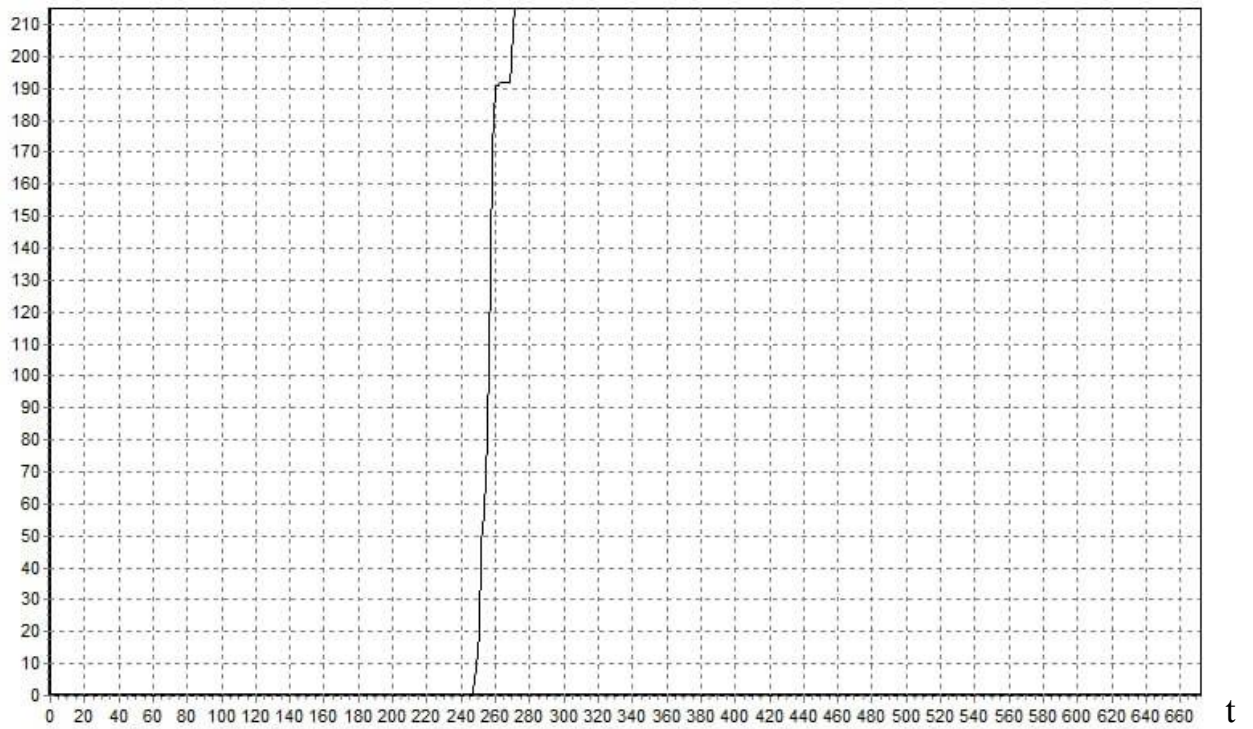


Рисунок 3.11 – Графік кількості центрів кристалізації, що утворилися в Al-Cu
($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

N

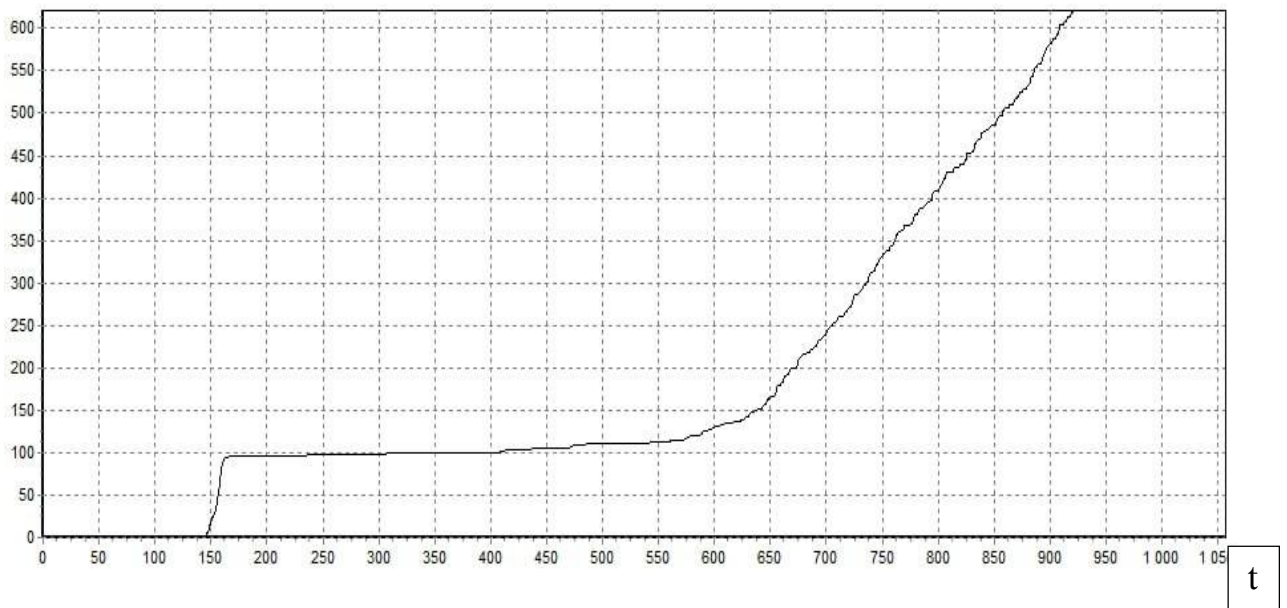


Рисунок 3.12 – Графік кількості центрів кристалізації, що утворилися в Al-Si
($V_{\text{охол}} = 0,5 \text{ K/c}$)

Як свідчать отримані дані, для систем Al-Cu та Al-Mg, що формують твердий розчин, характерним є стрімкий, практично вертикальний стрибок на графіках зародкоутворення. Цей феномен логічно пояснюється тим, що розплав протягом інкубаційного періоду накопичує значне термічне переохолодження [20]. Коли величина переохолодження досягає своєї критичної межі, енергія теплових флуктуацій масово долає термодинамічний бар'єр, ініціюючи вибухову гомогенну нуклеацію [10, 23]. Швидкість зародження досягає свого піку, формуючи стрімкий стрибок на графіку, але миттєво обривається через виділення прихованої теплоти кристалізації та супутню рекалесценцію [12].

Особливий науковий інтерес становить динаміка зародкоутворення у сплаві Al-Si. На відповідному графіку (рисунок 3.12) також чітко фіксується первинний стрімкий стрибок кількості нових центрів кристалізації, який відбувається безпосередньо перед початком формування розтягнутої евтектичної «полички» [6]. Згідно з теоретичними положеннями, викладеними в першому розділі роботи, саме цей первинний кінетичний стрибок є ключовим об'єктом для верифікації математичних моделей гомогенної нуклеації [10]. Він відображає процес утворення первинних кристалів твердої фази з переохоложеного розплаву, що повністю підпорядковується класичним формулам розрахунку термодинамічної роботи утворення критичного зародка [22]. Подальше пульсуюче утворення зародків, яке формує пологий схил на графіку, є вже вторинним процесом, зумовленим евтектичним перетворенням, тоді як саме різкий первинний стрибок визначає базовий кінетичний каркас макроструктури злитка та підтверджує універсальність теоретичного апарату для всіх типів досліджуваних систем [23].

Для верифікації виявлених кінетичних закономірностей було проведено додатковий аналіз динаміки зародкоутворення при максимальному значенні швидкості охолодження 8,5 К/с (рис. 3.13–3.15) [4].

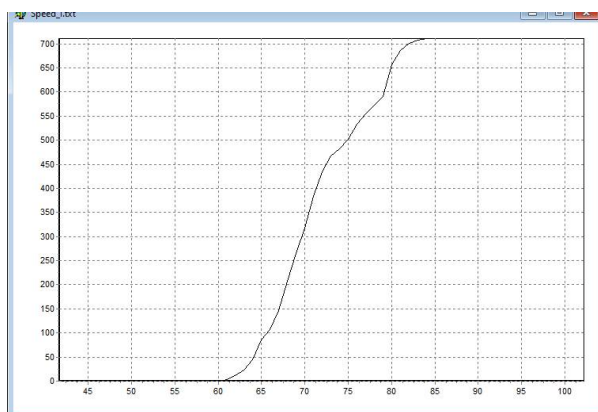


Рисунок 3.13 – Графік кількості центрів кристалізації Al-Cu при $V_{\text{охол}} = 8,5 \text{ K/s}$

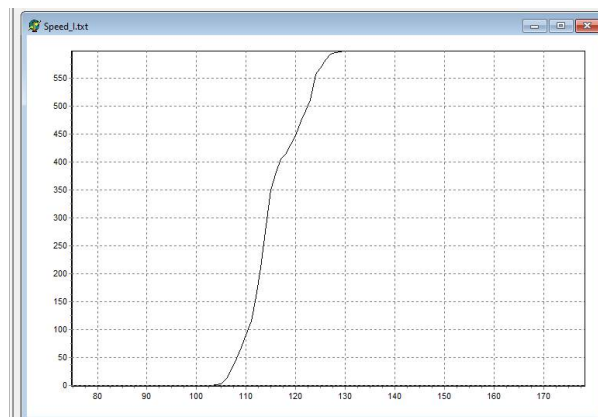


Рисунок 3.14 – Графік кількості центрів кристалізації Al-Mg при $V_{\text{охол}} = 8,5 \text{ K/s}$

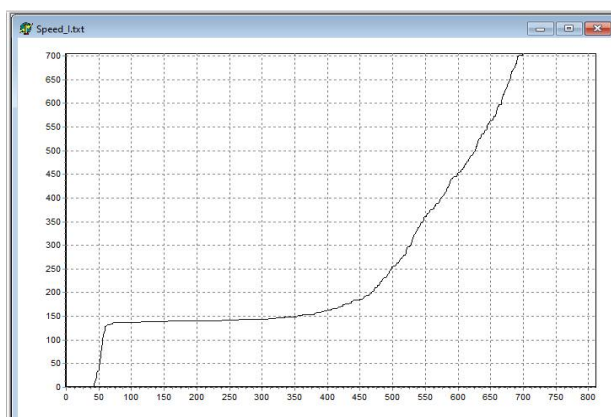


Рисунок 3.15 – Графік кількості центрів кристалізації Al-Si при $V_{\text{охол}} = 8,5 \text{ K/s}$

Порівняльний аналіз графіків для мінімальної 0,5 К/с та максимальної 8,5 К/с швидкостей дозволяє сформулювати важливий висновок щодо адекватності моделі: зміна інтенсивності тепловідводу призводить лише до пропорційної зміни загальної кількості центрів кристалізації, тоді як сама форма функціональної залежності та характер стадій нуклеації залишаються незмінними [4, 18]. Це підтверджує, що імітаційний алгоритм стабільно відтворює фізичну природу процесу незалежно від темпу охолодження.

Особливий науковий інтерес становить оцінка часових інтервалів активної фази нуклеації, яку дозволяє здійснити розроблена модель. Встановлено, що для сплаву Al-Cu період формування основної маси центрів становить від 1,5 с до 4,0 с, для Al-Mg – від 1,5 с до 2,7 с, а для системи Al-Si – від 0,6 с до 3,4 с [4]. Настільки стислі часові межі підтверджують гіпотезу про те, що кристалізація є глибоко нелінійним процесом [14]. Момент масової появи центрів кристалізації можна розглядати як точку біфуркації – критичну точку втрати термодинамічної стійкості переохолодженого розплаву, коли вся система миттєво переходить у новий якісний стан [10, 14]. Важливо підкреслити, що зафіксувати та кількісно оцінити ці критичні мікроінтервали часу в реальному натурному експерименті практично неможливо, що підтверджує виключну цінність імітаційного моделювання як інструменту глибокого аналізу фазових перетворень [10].

3.2 Вплив швидкості охолодження на дисперсність макроструктури сплавів

Одним із найефективніших технологічних інструментів керування процесом кристалізації та кінцевою дисперсністю литого металу є цілеспрямоване регулювання інтенсивності зовнішнього тепловідводу [30]. Для комплексного порівняльного аналізу впливу цього фактора на інтенсивність зародкоутворення у досліджуваних системах (Al-Cu, Al-Mg, Al-Si) було проведено розширену серію

комп'ютерних симуляцій [25]. Швидкість охолодження віртуального розплаву варіювалася в широкому технологічному діапазоні від 0,5 К/с до 8,5 К/с із постійним кроком 1,0 К/с. Отримані кількісні показники щодо сумарної кількості сформованих центрів первинної твердої фази та відповідних відносних похибок для кожного сплаву систематизовано й наведено у вигляді зведених таблиць 3.1–3.2.

Таблиця 3.1 – Залежність кількості центрів твердої фази при гомогенній кристалізації твердого розчину сплаву Al–4,5%Cu від швидкості його охолодження

№	Швидкість охолодження, К/с								
	0,5	1,5	2,5	3,5	4,5	5,5	6,5	7,5	8,5
1	31	96	131	182	293	387	503	589	695
2	26	71	155	190	242	357	484	606	662
3	34	81	141	211	268	350	500	599	718
4	29	97	151	202	272	367	489	588	717
5	30	85	135	211	261	372	496	583	709
6	32	75	123	206	280	342	476	615	702
7	33	87	143	199	284	380	519	607	686
8	43	80	128	196	263	340	500	586	676
9	34	85	145	211	278	390	477	598	723
10	34	96	136	195	287	354	481	570	695
11	42	75	137	198	280	373	498	603	711
ñ	33 ± 3	84 ± 4	139 ± 5	200 ± 6	273 ± 7	365 ± 8	493 ± 8	595 ± 9	699 ± 10
δ, %	9,1	4,8	3,6	3,0	2,6	2,2	1,6	1,5	1,4

Аналізуючи отримані дані для системи Al-Cu, можна констатувати найвищу інтенсивність зародкоутворення у досліджуваному діапазоні швидкостей: загальна кількість центрів стрімко зростає від 33 до 699 одиниць. Для підтвердження математичної достовірності цих результатів було розраховано лінійний коефіцієнт кореляції, який становить $R = 0,988$. Таке високе значення вказує на наявність надзвичайно сильного, практично детермінованого прямого

зв'язку між швидкістю відведення тепла та інтенсивністю зародкоутворення, що мінімізує ймовірність випадкових флуктуаційних відхилень у цій системі [25].

Таблиця 3.2 – Залежність кількості центрів твердої фази при гомогенній кристалізації твердого розчину сплаву Al–6%Mg від швидкості його охолодження

№	Швидкість охолодження, К/с								
	0,5	1,5	2,5	3,5	4,5	5,5	6,5	7,5	8,5
1	30	70	111	160	234(225)	330	400	496	634
2	27	70	105	168	237(227)	312	392	507	612
3	26	72	117	184	240(230)	332	431	484	608
4	28	66	112	159	225(214)	322	414	495	597
5	28	63	111	172	231(215)	305	408	506	612
6	21	75	123	165	208(194)	325	374	481	589
7	22	73	119	173	246(235)	309	404	478	624
8	35	77	113	173	236(226)	314	410	524	594
9	22	70	113	154	238(221)	313	411	502	569
10	37	69(70)	113	176	219(210)	307	392	501	595
11	26	74	112	172	224(212)	331	405	520	601
n	27 ± 3	71 ± 3	114 ± 4	169 ± 5	231 ± 6	318 ± 7	404 ± 8	499 ± 9	603 ± 10
δ, %	11,1	4,2	3,5	3,0	2,6	2,2	2,0	1,8	1,7

У системі Al-Mg фіксуються дещо нижчі кількісні показники (зростання від 27 до 603 одиниць), що зумовлено більш потужним ефектом рекалесценції, який значно швидше пригнічує подальшу нуклеацію [24]. Попри це, статистична надійність результатів залишається на стабільно високому рівні: розрахунковий коефіцієнт кореляції для даного сплаву також дорівнює $R = 0,988$. Це переконливо доводить, що процес нуклеації в магнієвому твердому розчині жорстко та передбачувано контролюється базовими термодинамічними параметрами охолодження [20, 30].

Окреме місце у проведеному циклі досліджень посідає система алюміній-кремній (Al-Si). На відміну від широкоінтервальних твердих розчинів, закономірності формування первинних центрів нуклеації у цьому сплаві мають

свої термодинамічні особливості, зумовлені евтектичною природою фазового перетворення. Отримані в результаті серії імітаційних експериментів кількісні дані щодо залежності кількості центрів твердої фази від швидкості зовнішнього охолодження для сплаву Al-8%Si узагальнено та представлено нижче у таблиці 3.3.

Таблиця 3.3 – Залежність кількості центрів твердої фази при гомогенній кристалізації твердого розчину сплаву Al–8%Si від швидкості його охолодження

№	Швидкість охолодження, К/с								
	0,5	1,5	2,5	3,5	4,5	5,5	6,5	7,5	8,5
1	9	27	36	54	73	71	103	106	148
2	7	26	34	61	70	71	96	117	131
3	5	20	51	53	65	81	107	104	127
4	7	22	41	48	67	66	97	121	141
5	6	21	39	46	74	81	86	129	138
6	6	25	39	46	60	87	97	121	124
7	13	31	35	51	82	103	92	120	131
8	8	29	37	60	75	81	98	108	145
9	8	30	38	51	66	76	104	99	131
10	8	18	38	58	66	85	94	111	134
11	10	31	37	50	72	87	105	121	135
ñ	8 ± 2	25 ± 3	39 ± 3	53 ± 3	70 ± 4	81 ± 5	101 ± 5	114 ± 5	135 ± 5
δ, %	25,0	12,0	7,7	5,7	5,7	6,2	5,0	4,4	3,7

Водночас система Al-Si демонструє найменшу кількість саме первинних центрів на етапі головного температурного стрибка (зростання лише від 8 до 135 одиниць). Така особливість безпосередньо пов'язана з її евтектичною природою та специфічним пульсуючим режимом кристалізації, де повільний дифузійний ріст обмежує початкову вибухову нуклеацію [8]. Однак саме ця система демонструє найвищу статистичну достовірність: коефіцієнт кореляції сягає високого значення $R = 0,999$. Настільки ідеальна кореляція переконливо

підтверджує, що базова стадія первинної нуклеації є абсолютно закономірною та строго підпорядковується загальним законам термодинаміки [23].

Підсумовуючи наведені розрахункові дані, можна виявити загальну металургійну закономірність, яка є абсолютно спільною для всіх без винятку досліджених систем [26]. Зі збільшенням швидкості охолодження розплаву спостерігається стабільне, майже лінійне зростання загальної кількості утворених центрів кристалізації. З термодинамічної точки зору цей феномен пояснюється тим, що інтенсивніший зовнішній тепловідвід забезпечує досягнення більш глибокого термічного переохолодження системи [20]. Згідно з класичними теоретичними моделями гомогенної нуклеації, збільшення переохолодження призводить до стрімкого зменшення критичного радіуса зародка та значного зниження активаційного енергетичного бар'єра [20, 22]. Як наслідок, набагато більша кількість локальних теплових флуктуацій у рідині отримує термодинамічну здатність трансформуватися у стійкі центри росту твердої фази, що у підсумку формує більш дисперсну структуру [27].

3.3 Висновки до розділу 3

1. У третьому розділі проведено комплексний порівняльний аналіз кінетики кристалізації трьох систем алюмінієвих сплавів (Al-Cu, Al-Mg, Al-Si). За результатами комп'ютерного моделювання достовірно встановлено, що природа легуючого елемента є впливає на термодинамічний баланс розплаву, визначаючи характер зародкоутворення та фінальну дисперсність макроструктури злитка [4]. Незважаючи на об'єктивні відмінності у внутрішній кінетиці, для всіх без винятку досліджених систем підтверджено загальну металургійну закономірність: підвищення швидкості зовнішнього охолодження в технологічному діапазоні від 0,5 К/с до 8,5 К/с стабільно призводить до закономірного збільшення загальної кількості центрів первинної твердої фази [25, 30].

2. Головним науковим результатом проведеного аналізу є ідентифікація та детальне дослідження феномену первинного кінетичного стрибка – різкого піку швидкості зародкоутворення, який фіксується на початкових етапах переохолодження розплаву у всіх трьох сплавах [10]. Для систем Al-Cu та Al-Mg, що утворюють тверді розчини, цей стрімкий стрибок фактично охоплює весь процес формування центрів, дуже швидко обриваючись через потужний тепловий ефект рекалесценції [12].

3. Особливо принциповим є виділення саме цього первинного стрибка у системі Al-Si. Встановлено, що для коректного математичного опису процесу гомогенної нуклеації необхідно аналізувати виключно цей перший вибуховий етап появи зародків, свідомо відокремлюючи його від подальшої розтягнутої евтектичної «полички» та вторинного мікропульсуючого утворення зерен [6].

4. Фокусування наукової уваги саме на цьому первинному стрибку має вирішальне методологічне значення для даної роботи. Оскільки цей короткочасний етап відображає «чистий» процес утворення первинних кристалів з переохолодженого розплаву до моменту масивного втручання вторинних теплових чи дифузійних факторів, отримані кількісні дані дозволяють провести пряму верифікацію математичних моделей гомогенної нуклеації [10, 14]. Це відкриває об'єктивну можливість практичного застосування та подальшої експериментальної перевірки теоретичної формули розрахунку термодинамічної роботи утворення критичного зародка, яка була детально розглянута в першому розділі роботи [2]. Таким чином, результати комп'ютерного моделювання та виявлені кінетичні закономірності створюють надійне підґрунтя для переходу від віртуальних експериментів до глибоких аналітичних розрахунків базових параметрів кристалізації [4, 18].

РОЗДІЛ 4 ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА

4.1 Науково-технічна актуальність НДР

У сучасному промисловому виробництві алюмінієві сплави систем Al-Si, Al-Cu та Al-Mg займають провідні позиції як основні конструкційні матеріали в аерокосмічній та автомобільній галузях. Однак під час виготовлення литих деталей із широкоінтервальних сплавів (зокрема систем алюміній-мідь та алюміній-магній) виникає серйозна технологічна проблема – висока схильність цих матеріалів до утворення гарячих тріщин під час застигання. Це призводить до високого відсотка браку, зниження надійності деталей та значних економічних збитків на виробництві.

Традиційний підхід до вирішення цієї проблеми базується на методі реальних фізичних експериментів («спроб і помилок»). Такий метод є економічно не вигідним та ресурсомістким, оскільки вимагає проведення десятків реальних плавок, витрати великої кількості дорогої сировини (алюмінію, міді, магнію), колосальних витрат електроенергії на роботу плавильних печей та зносу ливарного обладнання. Крім того, лабораторний аналіз отриманих зразків займає багато робочого часу персоналу.

Тому сучасне матеріалознавство переходить до методів комп'ютерного імітаційного моделювання. Використання апарату клітинних автоматів для моделювання процесу кристалізації дозволяє повністю усунути матеріальні витрати на реальні плавки. Комп'ютерна модель дає змогу віртуально протестувати будь-які швидкості охолодження від 0,5 К/с до 8,5 К/с та зафіксувати мікроінтервали часу утворення центрів кристалізації, що технічно неможливо зробити в умовах реального цеху.

Впровадження цифрового предиктивного аналізу дозволяє підприємствам заздалегідь визначати оптимальні режими охолодження для кожної конкретної деталі, уникати утворення гарячих тріщин і тим самим заощаджувати значні кошти на етапі відпрацювання технології. Саме тому дана науково-дослідна робота має високу науково-технічну та економічну актуальність.

4.2 Розрахунок витрат на проведення НДР

Розрахунок усіх витрат, пов'язаних з виконанням даної науково-дослідної роботи, дозволяє встановити її планову кошторисну вартість. Розрахунки проводяться за відповідними статтями витрат згідно з нормативами.

4.2.1 Витрати на оплату праці

Витрати за цією статтею включають заробітну плату безпосередніх виконавців теми. Оскільки робота має дослідницький характер, до її виконання залучені керівник (професор) та студент (інженер-дослідник). Витрати розраховуються на основі даних про трудомісткість окремих етапів робіт [31] що наведені в таблиці 4.1, та офіційних посадових окладів виконавців згідно зі штатним розписом КПІ ім. Ігоря Сікорського на 2026 рік [32].

Таблиця 4.1 – Трудомісткість робіт по темі

Найменування робіт по темі дослідження	Трудомісткість за виконавцями, людино-днів	
	Професор (людино-днів)	Інженер-дослідник (людино-днів)
1	2	3
1. Уточнення та конкретизація завдань	2	2
2. Аналіз науково-технічних публікацій	-	15

Продовження таблиці 4.1

Найменування робіт по темі дослідження	Трудомісткість за виконавцями, людино-днів	
	Професор (людино-днів)	Інженер-дослідник (людино-днів)
1	2	3
3. Розробка методики проведення дослідження	3	5
4. Проведення комп'ютерного моделювання	-	45
5. Аналіз отриманих результатів та обговорення	5	13
Разом за виконавцями теми	10	80

Середньоденна заробітна плата розраховується шляхом ділення посадового місячного окладу на усереднене число робочих днів за місяць (21,2 дні) [31]. Для розрахунку взято нормативи базових окладів, а самі результати обчислення витрат на оплату праці наведено в таблиці 4.2.

Таблиця 4.2 – Розрахунок витрат на оплату праці

Посада виконавців теми	Планова трудомісткість, люд-днів	Заробітна плата, грн		
		Посадовий місячний оклад	Середньоденна зарплата	Усього за виконавцями
1. Професор (керівник)	10	24 539,30	1 157,51	11 575,10
2. Інженер-дослідник	80	9 840,00	464,15	37 132,00
Разом оплата праці з теми (ФЗП)				48 707,10

4.2.2 Єдиний соціальний внесок

Єдиний соціальний внесок (ЄСВ) – це обов’язкове відрахування на загальнодержавне соціальне страхування. Ставка ЄСВ складає 22 % від фонду оплати праці виконавців згідно з чинним законодавством України [33]. Базою для нарахування ЄСВ слугують загальні витрати на оплату праці по темі.

$$\text{ЄСВ} = \text{ЗП} \times 0,22 ,$$

де ЗП – загальні витрати на оплату праці по темі.

Наразі ЄСВ буде становити:

$$\text{ЄСВ} = 48707,10 \times 0,22 = 10\,715,56 \text{ грн.}$$

4.2.3 Матеріали, необхідні для проведення досліджень

Оскільки дослідження базується на методах комп’ютерного імітаційного моделювання, всі експерименти виконувалися за допомогою персонального комп’ютера у віртуальному середовищі з використанням програмного забезпечення. З огляду на це, прямі витрати на шихтові матеріали, хімічні реактиви або інші фізичні витратні матеріали в даній роботі відсутні.

$$V_m = 0 \text{ грн.}$$

4.2.4 Енергоносії для проведення досліджень

Дослідження не передбачало проведення реальних плавок або термічної обробки в печах, тому витрати на енергоносії (електроенергію для ПК) автоматично включаються у статтю «Накладні витрати».

4.2.5 Витрати на спеціальне обладнання та послуги сторонніх організацій

Придбання специфічного обладнання або залучення сторонніх організацій для виконання роботи не передбачалося.

Витрати = 0 грн.

4.2.6 Інші прямі невраховані витрати

У цій статті поєднуються всі витрати на проведення НДР, що не увійшли до попередніх статей. При проведенні роботи інші прямі витрати приймаємо на рівні 10 % від суми врахованих витрат на виконання НДР.

$$I_B = (ЗП + ЄСВ + В_M) \times 0,1,$$

де V_M – витрати на матеріали (у даному випадку $V_M = 0$).

Наразі I_B буде становити:

$$I_B = (48\,707,10 + 10\,715,56 + 0) \times 0,1 = 5\,942,27 \text{ грн.}$$

4.2.7 Накладні витрати

Ця стаття включає витрати, пов'язані з управлінням організацією-виконавцем теми, витрати на забезпечення нормальних умов праці і техніки безпеки, а також амортизацію основних засобів. Розрахунок накладних витрат проводиться пропорційною сумі прямих витрат на рівні 20 %.

$$H_B = (ЗП + ЄСВ + В_M + I_B) \times 0,2.$$

Наразі Нв буде становити:

$$Нв = (48\,707,10 + 10\,715,56 + 0 + 5\,942,27) \times 0,2 = 65\,364,93 \times 0,2 = 13\,072,99 \text{ грн.}$$

4.2.8 Розроблення планової калькуляції кошторисної вартості теми

Планова калькуляція вартості проведення досліджень складається на підставі виконаних вище розрахунків та зводиться у таблицю 4.3.

Таблиця 4.3– Планова калькуляція кошторисної вартості НДР

Найменування статей витрат	Сума, грн	Обґрунтування
1	2	3
1. Витрати на оплату праці	48 707,10	Відповідно до розрахунків
2. Єдиний соціальний внесок	10 715,56	22 % від загальних витрат на оплату праці
3. Матеріали для проведення досліджень	0,00	Відповідно до специфіки комп'ютерного моделювання
4. Енергоносії та спецобладнання	-	Включаються у накладні витрати
5. Інші невраховані прямі витрати	5 942,27	10 % від суми прямих розрахованих витрат
6. Накладні витрати	13 072,99	20 % від суми прямих витрат
Усього витрат по темі	78 437,92	Сума попередніх статей

4.3 Науково-технічна ефективність НДР

Розрахунок очікуваного економічного ефекту є необхідним для визначення доцільності проведення науково-дослідної роботи. Проте прямої комерційної вигоди на етапі моделювання розрахувати неможливо, оскільки дана робота спрямована на теоретичне дослідження та оптимізацію параметрів.

У такому випадку, відповідно до методичних рекомендацій, використовується бальна система оцінювання економічної ефективності за наступними показниками [31]:

- важливість розробки (K_1);
- можливість використання результатів розробки (K_2);
- теоретичне значення та рівень новизни (K_3);
- складність дослідження (K_4).

Характеристики дослідження та відповідні їм бали наведені в таблиці 4.4.

Таблиця 4.4 – Бальна оцінка ефективності НДР

Показник оцінки ефективності НДР	Умовне позначення показника	Характеристики даної роботи	Кількість балів
1. Важливість розробки	K_1	Робота має галузеве значення	3
2. Можливість використання результатів	K_2	Результатами розробки можуть користуватися в масштабах однієї галузі	8
3. Теоретична значущість та рівень новизни	K_3	Результати суттєво розширюють уявлення про нерівноважні процеси	5
4. Складність дослідження	K_4	Роботу виконує один підрозділ, витрати становлять від 50 000 до 100 000 гривень	5

Загальна бальна оцінка (Б) вираховується шляхом перемноження отриманих коефіцієнтів за формулою:

$$B = K_1 \times K_2 \times K_3 \times K_4$$

В даному випадку загальна оцінка становить:

$$B = 3 \times 8 \times 5 \times 5 = 600 \text{ балів}$$

Умовний річний економічний ефект ($E_{\text{ндр}}$) від виконання науково-дослідної роботи розраховується за формулою:

$$E_{\text{ндр}} = 500 \times B - E_{\text{н}} \times V_{\text{ндр}}$$

де 500 – умовна вартість одного балу, грн;

$E_{\text{н}}$ – нормативний коефіцієнт економічної ефективності (приймаємо на рівні 0,2);

$V_{\text{ндр}}$ – сумарні витрати на виконання роботи (згідно з табл. 4.3 становить 78 437,92 грн).

Підставивши значення, отримуємо:

$$E_{\text{ндр}} = 500 \times 600 - 0,2 \times 78437,92 = 300000 - 15687,58 = 284312,42 \text{ грн}$$

Економічна ефективність роботи визначається коефіцієнтом умовної економічної ефективності E_e , який є відношенням умовного ефекту до сумарних витрат:

$$E_e = \frac{E_{\text{ндр}}}{V_{\text{ндр}}}$$

$$E_e = \frac{284312,42}{78437,92} = 3,62$$

Оскільки отриманий коефіцієнт умовної економічної ефективності ($E_e = 3,62$) є позитивним та суттєво перевищує одиницю (це свідчить про те, що на кожну витрачену гривню умовно отримується 3,62 грн ефекту), це повністю підтверджує високу доцільність, перспективність та економічну виправданість виконання даної науково-дослідної роботи.

4.4 Висновки до розділу 4

1. Обґрунтовано науково-технічну актуальність проведення дослідження процесу кристалізації за допомогою комп'ютерного імітаційного моделювання, що дозволяє значно скоротити витрати на реальні дорогі плавки.

2. Розраховано планову кошторисну собівартість проведення даної науково-дослідної роботи з урахуванням витрат на оплату праці та накладних витрат, яка сумарно склала 78 437,92 грн.

3. Проведено аналіз науково-технічної ефективності за бальною системою. Розрахований коефіцієнт ефективності становить 3,62, що повністю підтверджує доцільність та перспективність виконаної роботи з економічної точки зору.

РОЗДІЛ 5

ОХОРОНА ПРАЦІ

У даній дипломній роботі об'єктом дослідження є імітаційне моделювання процесу кристалізації сплавів системи Al-Cu. Усі розрахунки та моделювання виконуються за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення на персональному комп'ютері (ПК). Оскільки робота має виключно дослідницький та розрахунковий характер, вона не передбачає безпосереднього контакту з реальним металургійним обладнанням (печами, розплавленим металом тощо). Головним завданням цього розділу є виявлення та оцінка потенційних небезпечних і шкідливих виробничих факторів на робочому місці користувача ПК, а також розробка ефективних заходів щодо їх усунення або нормалізації для забезпечення безпечних умов праці.

5.1 Характеристика об'єкта та умови його експлуатації

Науково-дослідна робота виконується в лабораторному приміщенні (комп'ютерному класі). Основним технологічним обладнанням є персональний комп'ютер. Специфікацію технологічного обладнання та оснащення робочого місця наведено в таблиці 5.1.

Таблиця 5.1 – Специфікація технологічного обладнання та оснащення

№ п.п.	Найменування	Розміри Д/Ш/В	Основні характеристики	Кількість	Позиція на рисунку
1	Робоче місце (комп'ютерний стіл та ПК у зборі з монітором)	1200×700×750	Живлення – 220 В, 50 Гц; використовується для імітаційного моделювання	2	1, 2

Продовження таблиці 5.1

№ п.п.	Найменування	Розміри Д/Ш/В, мм	Основні характеристики	Кількість	Позиція на рисунку
2	Шафа для зберігання документів	800×400×2000	Матеріал – ДСП; зберігання робочої документації та креслень	3	3, 4, 5
3	Крісло робоче ергономічне	600×600×1100	Регулюється за висотою сидіння та кутом нахилу спинки	2	7,8

Для оцінки умов праці необхідно проаналізувати параметри самого приміщення (рис 5.1). Приміщення має вікно для забезпечення природного освітлення та систему штучного освітлення (люмінесцентні лампи або LED-панелі на стелі). Підлога покрита струмонепровідним матеріалом (лінолеум).

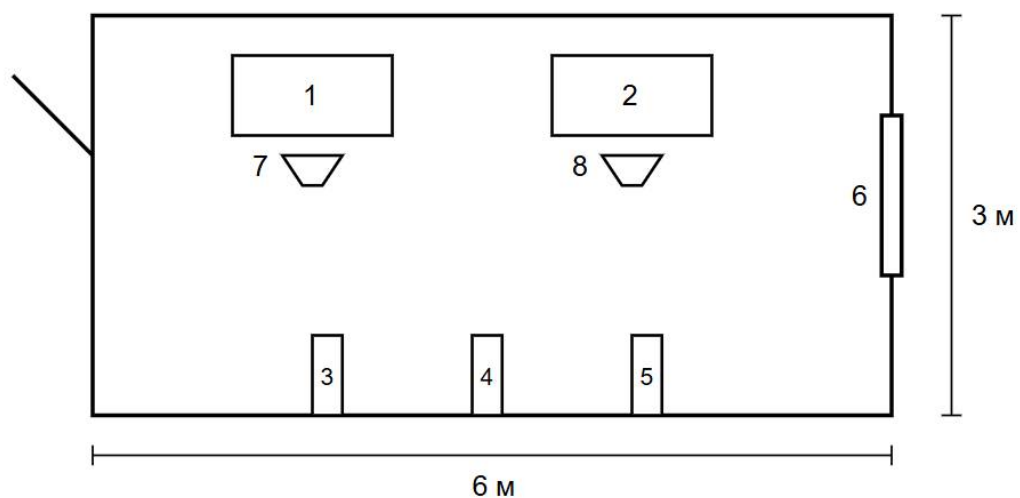


Рисунок 5.1 – План приміщення, вид зверху з розмірами

Щоб переконатися, що робоче місце відповідає санітарно-гігієнічним нормам, порівняємо реальні параметри приміщення з нормативними вимогами. Згідно з санітарними нормами, для комфортної роботи за ПК на одного працівника має виділятися певна площа та об'єм простору. Результати порівняння наведено в таблиці 5.2 [34].

Таблиця 5.2 – Реальні та нормативні характеристики приміщення і розміщення технологічного обладнання

№	Параметр приміщення	Реальне значення	Нормативні значення
1.	Площа на 1 працюючого	9,0 м ²	Не менше 4,5 м ²
2.	Об'єм простору на 1 працюючого	27,0 м ³	Не менше 15,0 м ³
3.	Мінімальна ширина проходу до робочого місця	1,0 м	Від 0,7 до 1,0 м

Аналіз характеристик приміщення показав, що виділена площа (9,0 м²) та об'єм (27,0 м³) на одне робоче місце повністю задовольняють вимоги нормативних документів, що виключає відчуття тісноти та забезпечує необхідний повітрообмін для нормальної роботи користувача ПК.

5.2 Оцінка небезпечних і шкідливих виробничих факторів

Аналіз умов праці є важливою складовою забезпечення безпеки життєдіяльності. Для того щоб користувач міг виконувати роботу безпечно та без фізичної або нервової перевтоми, необхідно виявити потенційні небезпеки. Оскільки технологічний процес полягає в комп'ютерному імітаційному моделюванні, основними джерелами небезпеки є комп'ютерна техніка, електромережа та тривале перебування у вимушеній робочій позі.

Перелік основних небезпечних та шкідливих факторів наведено в таблиці 5.3

Таблиця 5.3 – Основні небезпечні та шкідливі фактори, які створюються під час моделювання

№ п.п.	Найменування обладнання (оснащення)	Джерело небезпеки	Причини небезпеки	Наслідки небезпеки
1	Монітор (ПК-дисплей)	Випромінювання оптичного діапазону (HEV-випромінювання, «синє світло»)	Безперервна робота екрану під час аналізу результатів моделювання	Зорова втома, порушення циркадних ритмів, розвиток комп'ютерного зорового синдрому
2	Системний блок ПК, периферійні пристрої	Електричний струм	Пошкодження ізоляції кабелів, коротке замикання, відсутність заземлення	Ураження електричним струмом, електротравма
3	Електропроводка, блок живлення ПК	Небезпека пожежі	Перегрів блоку живлення при тривалих обчисленнях, іскріння в контактах	Пошкодження обладнання, термічні опіки, задимлення приміщення
4	Робоче місце (стілець, стіл)	Психофізіологічні фактори (статичне перенавантаження)	Тривале перебування в сидячій робочій позі, нераціональна ергономіка	Остеохондроз, перенапруження м'язів спини та шиї, порушення кровообігу

Для об'єктивної оцінки виявлених факторів необхідно порівняти їх реальні (розрахункові) значення з нормативними, які встановлені державними стандартами та санітарними нормами які наведені у таблиці 5.4.

Таблиця 5.4 – Реальні та нормативні фактори небезпеки, що створюються в робочому процесі

№ п.п.	Фактор небезпеки	Реальне значення	Нормативні значення
1	Рівень освітленості робочої поверхні від системи загального штучного освітлення	400 лк	300 – 500 лк (згідно з ДБН В.2.5-28:2018 [35])
2	Напруга в мережі живлення комп'ютерної техніки	220 В	220 В (згідно з ПУЕ-2017 [36])
3	Температура повітря в приміщенні (холодний період року)	22 °С	22 – 24 °С (згідно з ДСН 3.3.6.042-99 [37])
4	Час безперервної роботи за екраном монітора до регламентованої перерви	45 хв	Не більше 1 години (згідно з ДСанПіН 3.3.2.007-98 [34])

5.3 Вимоги безпеки під час виконання моделювання на ПК

Оскільки науково-дослідна робота пов'язана з тривалим застосуванням засобів обчислювальної техніки для чисельного розв'язання диференціальних рівнянь кристалізації [1], організація робочого процесу матеріалознавця та експлуатація обладнання мають суворо відповідати специфіці виробничої санітарії та гігієни праці на комп'ютеризованих робочих місцях [38]. Процес моделювання на базі клітинних автоматів створює підвищене навантаження на ПЕОМ, що зумовлює необхідність виконання комплексу вимог для мінімізації ризиків травматизму, електронебезпеки та розвитку професійних захворювань [38].

Вимоги безпеки перед початком роботи:

- Провести візуальний огляд комп'ютеризованого робочого місця, перевірити стійкість розміщення монітора, системного блоку та клавіатури на поверхні робочого столу [38].

- Переконалися у відсутності механічних пошкоджень корпусів електроустановок, ізоляції силових кабелів живлення, а також у надійності підключення заземлюючих провідників периферії до контуру заземлення лабораторії [38].

- Перевірити вентиляційні отвори системного блоку (в зоні розташування кулерів процесора та блока живлення); вони мають бути повністю відкритими для забезпечення штатного відведення тепла при інтенсивних розрахунках [38].

Вимоги безпеки під час виконання обчислень:

- Під час запуску тривалих циклічних симуляцій структуроутворення у використовуваному програмному комплексі для моделювання кристалізації забороняється захарашувати робочу зону паперами [38].

- Категорично забороняється розміщувати на робочому столі поруч із клавіатурою, монітором або розетками живлення ємності з водою та іншими рідинами для запобігання їх випадковому пролиттю, що викликає коротке замикання та створює пряму загрозу електроураження дослідника [38].

- Забороняється самостійно відкривати захисні кожухи обчислювальної техніки, проводити заміну плавких запобіжників або здійснювати будь-які ремонтні та комутаційні маніпуляції з кабелями й платами, які перебувають під робочою напругою 220 В [38].

Для профілактики зорової втоми, статичних перенавантажень та запобігання розвитку комп'ютерного зорового синдрому під час безперервного моніторингу графічних вікон нуклеації, інженер повинен забезпечити ергономічні параметри постави: відстань від очей до екрана має становити (600–700) мм, а лінія зору – бути перпендикулярною до поверхні дисплея [38].

Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях:

- У разі виявлення ознак несправності обчислювальної техніки або елементів живлення (поява специфічного запаху горілої ізоляції, виникнення

нетипового сильного шуму кулерів, відчуття дії електричного струму при дотику до металевого корпусу або іскріння в розетці) розрахунковий процес необхідно миттєво зупинити [38].

- Не очікуючи на закриття програмних інтерфейсів, негайно знеструмити весь комп'ютерний комплекс за допомогою центрального тумблера блока живлення або загального вимикача мережі на робочому місці [38].

- Зафіксувати стан аварійної ситуації, залишити робоче місце та терміново повідомити про інцидент керівника науково-дослідної лабораторії; самостійне розбирання та ремонт техніки суворо забороняються [38].

5.4 Мікроклімат робочої зони та його вплив на організм

Мікроклімат виробничих приміщень – це умови внутрішнього середовища, що впливають на тепловий обмін працюючих з оточуючим середовищем [38]. Оскільки дослідник проводить багато часу за ПК, стан повітря в лабораторії дуже важливий для його здоров'я [38].

Основними параметрами мікроклімату є [38]:

- температура повітря;
- відносна вологість повітря;
- швидкість руху повітря.

Мікроклімат істотно впливає на самопочуття та працездатність людини [38]. Якщо в приміщенні занадто жарко, це призводить до порушення обміну речовин та роботи серцево-судинної системи [38]. Наприклад, збільшення температури повітря з 20 °С до 35 °С призводить до зниження працездатності людини на 50–60 % [38]. З іншого боку, переохолодження (гіпотермія) може викликати невралгію та застудні захворювання [38].

Нормування мікроклімату здійснюється за санітарними нормами ДСН 3.3.6.042-99, згідно з якими усі роботи діляться на категорії за рівнем витрат енергії [37]. Робота оператора за комп'ютером під час моделювання належить до категорії легких робіт (підкатегорія Ia) [37].

Для таких робіт у холодний період року встановлені чіткі оптимальні норми [37]:

- температура повітря повинна бути в межах 22–24 °С [37];
- швидкість руху повітря не повинна створювати протягів [37].

Як видно з проведених вимірювань (таблиця 5.4), реальна температура в нашій лабораторії становить 22 °С. Це означає, що умови повністю відповідають нормативним вимогам і є безпечними для інженера-дослідника та його керівника [38].

5.5 Вплив шуму та випромінювання монітора на дослідників

Під час виконання імітаційного моделювання комп'ютерна техніка в лабораторії генерує фізичні фактори, які можуть негативно впливати на здоров'я інженера-дослідника та його керівника [38]. Основними з них є виробничий шум та випромінювання від екрана монітора [38].

Виробничий шум створюється кулерами систем охолодження процесорів та блоками живлення ПК [38]. Тривалий вплив навіть монотонного шуму діє як подразник для нервової системи [38]. Він викликає швидку втому, зниження уваги та головний біль [38]. Щоб зменшити цей вплив, у лабораторії системні блоки розміщені раціонально, а техніка підтримується у справному стані [38].

Іншим шкідливим фактором є оптичне випромінювання від рідкокристалічних моніторів, зокрема «синє світло» (HEV-випромінювання) [38]. Під час тривалого спостереження за графіками кристалізації на екрані, це світло проникає до сітківки ока [38]. Це призводить до розвитку так званого

комп'ютерного зорового синдрому: очі починають пекти, червоніють, з'являється відчуття сухості [38]. Крім того, робота за монітором у вечірній час може порушити сон [38].

Для надійного захисту зору під час розрахунків рекомендується використовувати спеціальні захисні комп'ютерні окуляри (blue-blockers), які відсікають шкідливу частину синього спектра і знижують навантаження на очі [38].

5.6 Ергономіка робочого місця та режими праці і відпочинку

Для збереження здоров'я та високої працездатності інженера-дослідника під час тривалого комп'ютерного моделювання, робоче місце має відповідати строгим ергономічним вимогам. Конструкція робочого місця користувача ПК має забезпечувати підтримання оптимальної робочої пози з такими ергономічними характеристиками: ступні ніг на підлозі або на підставці для ніг; стегна в горизонтальній площині; передпліччя вертикально; лікті під кутом 70° - 90° до вертикальної площини; зап'ястя зігнуті під кутом не більше 20° відносно горизонтальної площини, нахил голови 15° - 20° відносно вертикальної площини.

Робочий стіл для ПК має бути обладнаний спеціальною підставкою для ніг шириною не менше (300) мм та глибиною не менше (400) мм, з можливістю регулювання по висоті та кута нахилу опорної поверхні в межах 20° .

Окрім правильної пози, ключовим фактором безпеки є суворе дотримання режимів праці та відпочинку [38]. Враховуючи високе зорове та нервово-емоційне напруження при роботі з графічними інтерфейсами та масивами даних, безперервна робота за монітором не повинна перевищувати 4 години за зміну без технологічних перерв.

Для профілактики перевтоми встановлюється такий регламент:

- через кожну годину безперервної роботи за екраном обов'язково влаштовується перерва тривалістю 10–15 хвилин;
- під час регламентованих перерв дослідник повинен повністю відвести погляд від монітора, піднятися з крісла та виконати комплекс профілактичних вправ;
- вправи для очей (переведення погляду вдалечінь, кругові рухи очима) дозволяють зняти спазм акомодациї та запобігти зниженню гостроти зору;
- вправи для опорно-рухового апарату (нахили голови, розминка плечового поясу, присідання) відновлюють кровообіг у шийному відділі хребта та органах малого таза після тривалого сидіння.

Впровадження таких режимів дозволяє уникнути перенапруження та зберегти концентрацію уваги до кінця розрахункового процесу [38].

5.7 Розрахунок системи штучного освітлення комп'ютерної лабораторії

Оскільки природного освітлення не завжди достатньо для забезпечення комфортної роботи інженера-дослідника (особливо в осінньо-зимовий період або у вечірню зміну), в лабораторії обов'язково використовується система штучного загального рівномірного освітлення [38]. Недостатня освітленість робочої зони призводить до швидкої зорової втоми, зниження загальної концентрації та збільшення ймовірності помилок під час зчитування графічних результатів моделювання [38].

Для розрахунку необхідної кількості світильників та потужності ламп у приміщенні комп'ютерної лабораторії застосуємо метод коефіцієнта використання світлового потоку. Цей метод є найбільш точним для розрахунку загального рівномірного освітлення горизонтальних робочих поверхонь.

Основна розрахункова формула для визначення необхідного світлового потоку однієї лампи (F , лм) має такий вигляд:

$$F = \frac{E \times S \times k \times z}{N \times \eta},$$

де E – нормована мінімальна освітленість робочої поверхні. Згідно з ДБН В.2.5-28:2018 [37] для зорових робіт високої точності при роботі за візуальними терміналами $E = 400$ лк;

S – площа приміщення лабораторії. За геометричними розмірами з плану (рис. 5.1) $S = 6 \times 3 = 18 \text{ м}^2$;

k – коефіцієнт запасу, який враховує старіння ламп та запилення світильників. Для чистих приміщень і сучасних LED-ламп приймаємо $k = 1,2$;

z – коефіцієнт нерівномірності освітлення. Для світлодіодних панелей рівномірного світлорозподілу $z = 1,1$;

N – загальна кількість ламп у приміщенні. Приймаємо до встановлення 4 стельові світильники по 2 лампи в кожному, тобто $N = 8$ ламп;

η – коефіцієнт використання світлового потоку (в частках одиниці).

Для визначення коефіцієнта η необхідно спочатку розрахувати індекс приміщення (i) за формулою:

$$i = \frac{S}{h_p \times (A+B)},$$

де A та B – довжина і ширина приміщення відповідно ($A = 6 \text{ м}$, $B = 3 \text{ м}$);

h_p – розрахункова висота підвісу світильників над робочою поверхнею столу.

$$h_p = H = h_{\text{ст}} - h_p,$$

де $H = 3,0 \text{ м}$ (загальна висота приміщення);

$h_{\text{ст}} = 0 \text{ м}$ (світильники вбудовані у підвісну стелю);

$h_p = 0,75 \text{ м}$ (висота робочого столу комп'ютерного місця).

Отже, $h_p = 3,0 - 0 - 0,75 = 2,25$ м.

Підставивши значення, знаходимо індекс приміщення:

$$i = \frac{18}{2,25 \times (6+3)} = \frac{18}{20,25} = 0,89.$$

Приймаємо розрахункове значення $i = 0,9$.

Враховуючи, що в лабораторії світлі стіни та стеля, приймаємо такі коефіцієнти відбиття: для стелі $\rho_{ст} = 70\%$, для стін $\rho_{стн} = 50\%$, для підлоги $\rho_{п} = 10\%$. Згідно з довідковими таблицями для світильників прямого світла при індексі приміщення $i = 0,9$ коефіцієнт використання світлового потоку $\eta = 0,45$.

Тепер підставимо всі визначені параметри в основну формулу:

$$F = \frac{400 \times 18 \times 1,2 \times 1,1}{8 \times 0,45} = \frac{9504}{3,6} = 2640 \text{ лм.}$$

За отриманим значенням світлового потоку $F = 2640$ лм підбираємо найближчу за характеристиками стандартну лампу. Найбільш оптимальним рішенням для забезпечення такого світлового потоку є застосування сучасних лінійних світлодіодних ламп (LED) формату T8 потужністю 22 Вт, які генерують номінальний світловий потік $F_{ном} = 2700$ лм.

Перевіримо допустиме відхилення фактичного світлового потоку від розрахункового:

$$\Delta = \frac{F_{ном} - F}{F} \times 100\% = \frac{2700 - 2640}{2640} \times 100\% = 2,27\%.$$

Згідно з нормативними вимогами [38], відхилення фактичної освітленості від розрахункової допускається в межах від -10% до +20%. Отримане відхилення у 2,27% повністю лежить у допустимих межах. Таким чином, вибрана система штучного освітлення (4 світильники по дві LED-лампи 22 Вт) гарантовано забезпечить нормативний рівень освітленості робочого місця інженера-дослідника та мінімізує зорову втому.

5.8 Заходи забезпечення охорони праці

На основі проведеного аналізу розроблено комплекс технічних, режимних та організаційних заходів, що обмежують вплив виявлених небезпек до нормативних значень. Особливу увагу приділено захисту органів зору від специфічного випромінювання сучасних дисплеїв у таблиці 5.5.

Таблиця 5.5 – Заходи забезпечення охорони праці на робочому місці

№ п.п.	Група заходів	Вид заходу	Критерій вибору
1	Технічні заходи	Захисне заземлення корпусів ПК, застосування пристрою захисного відключення (ПЗВ)	Забезпечення миттєвого відключення живлення та захист від ураження струмом у разі пробою ізоляції.
2	Режимні заходи	Дотримання регламентованого режиму праці та відпочинку (перерви 10-15 хв після кожної години роботи)	Зняття статичного напруження з м'язів спини, профілактика зорової втоми.

3	Пожежна безпека	Оснащення приміщення вуглекислотним вогнегасником (типу ВВК-2)	Вуглекислота не пошкоджує мікросхеми та дозволяє безпечно гасити електрообладнання під напругою до 1000 В.
---	-----------------	--	--

Продовження таблиці 5.5

№ п.п.	Група заходів	Вид заходу	Критерій вибору
4	Засоби індивідуального захисту	Використання спеціальних захисних комп'ютерних окулярів (blue-blockers) з фільтром HEV-випромінювання	Ефективне блокування шкідливого "синього спектра" монітора, зниження навантаження на сітківку ока.

5.9 Висновки до розділу 5

В ході виконання даного розділу було проаналізовано умови праці інженера-дослідника за ПК. Встановлено, що параметри приміщення відповідають нормативним вимогам. Основними факторами ризику є електробезпека, пожежна безпека та зорова втома від впливу HEV-випромінювання монітора. Запропонований комплекс заходів, зокрема використання спеціалізованих захисних окулярів, заземлення та дотримання регламентованих перерв, дозволяє повністю нівелювати вплив шкідливих факторів та гарантувати безпечні умови праці.

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

1. У ході проходження дипломної роботи вирішено науково-прикладну задачу щодо встановлення закономірностей кінетики кристалізації та особливостей макроструктурування бінарних алюмінієвих сплавів систем Al-Cu, Al-Mg та Al-Si залежно від інтенсивності теплового відводу із застосуванням методів імітаційного моделювання. На основі проведеного аналізу літературних джерел було вибрано імітаційну модель кристалізації бінарних сплавів для проведення досліджень впливу швидкості охолодження на утворення центрів твердої фази. Дана модель базується на клітинних автоматах і дозволяє детально відтворити флуктуаційну природу появи зародків твердої фази за нерівноважних умов кристалізації.

2. Під час виконання методичної частини роботи було здійснено повне налаштування віртуального середовища, включаючи розробку алгоритму адаптації складної системи алюміній-мідь до імітаційної моделі шляхом створення еквівалентної квазібінарної діаграми стану. Завдяки проведенню серії калібрувальних розрахунків було встановлено точні значення коефіцієнтів тепловіддачі, що забезпечило отримання стабільних швидкостей охолодження сплавів в технологічному діапазоні від 0,5 К/с до 8,5 К/с.

3. В ході проведення комп'ютерних експериментів встановлено закономірність лінійного зростання кількості центрів кристалізації при підвищенні швидкості охолодження розплаву. Особливе значення має ідентифікація феномену первинного кінетичного стрибка, який розглядається як точка біфуркації системи. Оцінка часових інтервалів активної нуклеації за допомогою комп'ютерної моделі підтвердила глибоку нелінійність процесу кристалізації. Отримані дані щодо мікроінтервалів часу формування зародків, які практично неможливо зафіксувати у натурному експерименті, створюють надійне підґрунтя для подальшої теоретичної верифікації математичних моделей гомогенної нуклеації у межах дипломної роботи

4. Аналіз візуальних та кількісних результатів моделювання дозволив підтвердити принципові відмінності у механізмах формування структури сплавів систем Al-Si, Al-Cu, Al-Mg. Показано, що широкоінтервальні сплави кристалізуються за периферійною схемою, створюючи жорсткий каркас із рідкою серцевиною, що є головним термодинамічним чинником їхньої схильності до утворення гарячих тріщин, тоді як евтектичні системи демонструють значно вищу технологічну стійкість.

5. Виконано техніко-економічне обґрунтування проведеної науково-дослідної роботи. Доведено, що використання комп'ютерного імітаційного моделювання дозволяє повністю уникнути витрат на реальні плавки та дороге сировинне забезпечення. Розрахована планова кошторисна вартість дослідження становить 78 437,92 грн. Визначений коефіцієнт умовної економічної ефективності складає 3,62, що беззаперечно підтверджує доцільність та виправданість виконаної роботи з економічної точки зору.

6. Проведено детальний аналіз умов праці на робочому місці інженера-дослідника. Ідентифіковано основні небезпечні та шкідливі фактори при роботі з комп'ютерною технікою, серед яких найбільший вплив мають електробезпека, пожежна безпека та зорова втома від специфічного випромінювання оптичного діапазону (HEV-випромінювання). Розроблено комплекс технічних, організаційних та режимних заходів. Встановлено, що застосування пристрою захисного відключення (ПЗВ), наявність вуглекислотного вогнегасника, дотримання регламентованих перерв та використання спеціалізованих комп'ютерних окулярів із фільтром синього спектра дозволяють повністю нівелювати шкідливі фактори та гарантують безпечні умови праці.

GENERAL CONCLUSIONS

1. During the course of completing the thesis, the scientific and applied task of determining the patterns of crystallization kinetics and macrostructuring features of binary During the course of this diploma research, a scientific and applied problem was solved concerning the determination of crystallization kinetics patterns and macrostructure formation features of binary aluminum alloys in the Al-Cu, Al-Mg, and Al-Si systems depending on the intensity of heat extraction using simulation modeling methods. Based on a comprehensive analysis of the available literature, a simulation model of binary alloy crystallization was selected to investigate the effect of cooling rate on the formation of solid-phase nucleation centers. The chosen model is based on the cellular automata approach and enables detailed reproduction of the fluctuation-driven nature of solid-phase nucleation under non-equilibrium crystallization conditions.

2. During the methodological stage of the research, a complete configuration of the virtual simulation environment was carried out, including the development of an algorithm for adapting the complex aluminum–copper system to the simulation model through the creation of an equivalent quasi-binary phase diagram. A series of calibration calculations made it possible to determine accurate heat-transfer coefficient values, ensuring stable alloy cooling rates within the technological range from 0.5 K/s to 8.5 K/s.

3. The computer experiments revealed a linear increase in the number of crystallization centers with increasing melt cooling rate. Of particular importance was the identification of the primary kinetic jump phenomenon, which can be interpreted as a bifurcation point of the system. The evaluation of active nucleation time intervals using the computer model confirmed the pronounced nonlinearity of the crystallization process. The obtained data on micro-time intervals of nucleus formation, which are practically impossible to record in full-scale experiments, provide a reliable basis for the

further theoretical verification of mathematical models of homogeneous nucleation within the scope of this diploma research.

4. The analysis of visual and quantitative simulation results confirmed fundamental differences in the structure formation mechanisms of alloys belonging to the Al-Si, Al-Cu, and Al-Mg systems. It was demonstrated that wide-solidification-range alloys crystallize according to a peripheral solidification pattern, forming a rigid shell with a liquid core. This phenomenon represents the primary thermodynamic factor responsible for their susceptibility to hot cracking. In contrast, eutectic systems exhibit significantly higher technological stability during solidification.

5. A technical and economic assessment of the conducted scientific research was performed. It was demonstrated that the use of computer simulation modeling makes it possible to completely eliminate the costs associated with real melting experiments and expensive raw materials. The calculated planned estimated cost of the research amounted to UAH 78,437.92. The determined coefficient of conditional economic efficiency was 3.62, unequivocally confirming the feasibility and economic justification of the completed work.

6. A detailed analysis of working conditions at the workplace of a research engineer was conducted. The main hazardous and harmful factors associated with computer-based work were identified, among which electrical hazards, fire hazards, and visual fatigue caused by high-energy visible (HEV) radiation have the greatest impact. A comprehensive set of technical, organizational, and operational safety measures was developed. It was established that the use of a residual current device (RCD), the availability of a carbon dioxide fire extinguisher, compliance with regulated work-rest schedules, and the use of specialized computer glasses equipped with blue-light filters effectively eliminate harmful factors and ensure safe working conditions..

СПИСОК ДЖЕРЕЛ

1. Бялік О. М. Матеріалознавство : підручник / О. М. Бялік, Д. Ф. Чернега, В. М. Смірнов. – К. : Політехніка, 2006. – 384 с.
2. Belov N. A. Iron in Aluminum Alloys: Impurity and Alloying Elements / N. A. Belov, A. A. Aksenov, D. G. Eskin. – London : CRC Press, 2002. – 360 p.
3. Campbell J. Complete Casting Handbook: Metal Casting Processes, Metallurgy, Techniques and Design. – 2nd ed. – Oxford : Butterworth-Heinemann, 2015. – 1238 p.
4. Доній О. М. Комп'ютерне моделювання структури металевих матеріалів. Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студентів спец. 132 «Матеріалознавство» / О. М. Доній, В. В. Христенко, Ю. В. Яворський. – К. : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 155 с. – Режим доступу: <https://ela.kpi.ua/items/62c75738-3f17-421c-9055-8724efd32a6c> (дата звернення: 28.04.2026).
5. Кулініч А. А. Вплив параметрів кристалізації на структуру і механічні властивості сплавів АМг6л та АМг10 / А. А. Кулініч, С. М. Котляр // Вісник Інженерної академії України. – 2012. – Вип. 1. – С. 196–200.
6. Доній О. М. Імітаційне моделювання гомогенної та гетерогенної кристалізації Al та сплаву Al-Si / О. М. Доній // Вісник НТУУ «КПІ». Серія Машинобудування. – 2011. – № 61, т. 2. – С. 72–78.
7. Eskin D. G. Mechanical properties in the semi-solid state and hot tearing of aluminium alloys / D. G. Eskin, L. Katgerman // Progress in Materials Science. – 2004. – Vol. 49, no. 5. – P. 629–711.
8. Фон Прус М. А. Моделювання структуроутворення при кристалізації сплаву Al-8,2%Si / М. А. Фон Прус // Матеріали для роботи в екстремальних умовах - 6 : тези Міжнародної наукової конференції (Київ, 2017 р.). – К. : НТУУ «КПІ», 2017. – С. 373–375.

9. Donii O. Modeling of metal crystallization by means of cellular automation / O. Donii // *Materials science. Non-equilibrium phase transformations.* – 2017. – № 4. – P. 150–153.
10. Доній О. М. Теоретичне визначення критичного розміру зародка при гомогенній кристалізації з використанням синергетики / О. М. Доній // *Металознавство та обробка металів.* – 2010. – № 3 (55). – С. 17–20.
11. Dantzig J. A. Solidification / J. A. Dantzig, M. Rappaz. – 2nd ed. – Lausanne : EPFL Press, 2016. – 644 p.
12. Stefanescu D. M. Science and Engineering of Casting Solidification / D. M. Stefanescu. – 3rd ed. – Switzerland : Springer, 2015. – 564 p.
13. Неруш В. Б. Імітаційне моделювання систем та процесів : навчальний посібник / В. Б. Неруш, В. В. Курдеча. – К. : НТУУ «КПІ», 2012. – 115 с.
14. Haken H. Synergetics: An Introduction / H. Haken. – 3rd ed. – Berlin : Springer, 1983. – 371 p.
15. Wolfram S. A New Kind of Science / S. Wolfram. – Champaign : Wolfram Media, 2002. – 1197 p.
16. Железний В. П. Експериментальна теплофізика. Методи дослідження речовин / В. П. Железний. – К. : Фенікс, 2016. – 320 с.
17. Імітаційна модель кристалізації та структурування алюмінієвих сплавів / О. М. Бялік, О. М. Доній, А. А. Кулініч та ін. // *Фізико-хімічна механіка матеріалів.* – 2003. – Т. 39, № 6. – С. 88–91.
18. Kulinich A. Computer system for the predicting the structure and properties of cast metal products / A. Kulinich, V. Khristenko // *International scientific journal Mathematical Modeling.* – 2017. – P. 180–183.
19. Чисельні методи : навч. посіб. / Л. О. Волонтир, Л. В. Зелінська, Н. А. Потапова, І. А. Чіков. – Вінниця : ВНАУ, 2020. – 322 с.

20. Glicksman M. E. Principles of Solidification / M. E. Glicksman. – New York : Springer, 2011. – 520 p.
21. Porter D. A. Phase Transformations in Metals and Alloys / D. A. Porter, K. E. Easterling, M. Y. Sharif. – 3rd ed. – Boca Raton : CRC Press, 2009. – 520 p.
22. Панченко О. В. Фізика металів : підручник / О. В. Панченко, В. І. Мазур. – Дніпро : Ліра, 2017. – 432 с.
23. Kondepudi D. Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures / D. Kondepudi, I. Prigogine. – 2nd ed. – Chichester : Wiley, 2014. – 552 p.
24. Luzau J. Solidification of Alloys / J. Luzau, M. Rappaz. – Berlin : Springer Nature, 2020. – 380 p.
25. Статюха Г. О. Вступ до планування оптимального експерименту : навчальний посібник / Г. О. Статюха, Д. М. Складанний, О. С. Бондаренко. – К. : ІВЦ «Політехніка», 2011. – 117 с.
26. Основи металургійного виробництва / О. В. Гутя [та ін.]. – Львів : Видавництво Львівської політехніки, 2017. – 256 с.
27. Заблоцький В. К. Фізика металів. Електронна будова, термодинаміка і кінетика фазових перетворень / В. К. Заблоцький. – Краматорськ : ДДМА, 2015. – 268 с.
28. Hatch J. E. Aluminum: Properties and Physical Metallurgy / J. E. Hatch. – Metals Park, Ohio : ASM International, 1984. – 424 p.
29. Mondolfo L. F. Aluminum Alloys: Structure and Properties / L. F. Mondolfo. – London : Butterworths, 1976. – 971 p.
30. Incropera F. P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer / F. P. Incropera, D. P. DeWitt. – 6th ed. – New York : John Wiley & Sons, 2006. – 997 p.
31. Організація та планування виробництва. Економічне обґрунтування науково-дослідних робіт [Електронний ресурс] : методичні вказівки до виконання економіко-організаційного розділу випускних кваліфікаційних робіт /

уклад. О. А. Бояринова, К. В. Копішинська. – Електронні текстові дані. – К. : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2026. – Режим доступу: <https://ela.kpi.ua/> (дата звернення: 24.05.2026).

32. Штатний розпис Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» на 2026 рік [Електронний ресурс] : затв. М-вом освіти і науки України. – Електронні дані. – Режим доступу: <https://document.kpi.ua/> (дата звернення: 24.05.2026). – Назва з екрана.

33. Про збір та облік єдиного внеску на загальнообов'язкове державне соціальне страхування [Електронний ресурс] : Закон України від 08.07.2010 р. № 2464-VI // Відомості Верховної Ради України. – 2011. – № 2–3. – Ст. 11. – Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2464-17> (дата звернення: 25.05.2026).

34. Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин [Електронний ресурс] : ДСанПіН 3.3.2.007-98. – Чинні від 1999-01-01. – К. : МОЗ України, 1998. – Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v0007282-98> (дата звернення: 25.05.2026).

35. Природне та штучне освітлення [Електронний ресурс] : ДБН В.2.5-28:2018. – На заміну ДБН В.2.5-28-2006 ; чинний від 2019-03-01. – К. : Мінрегіон України, 2018. – 134 с. – Режим доступу: https://ledeffect.com.ua/images/__branding/dbn2018.pdf (дата звернення: 28.05.2026)

36. Правила улаштування електроустановок (ПУЕ-2017) [Електронний ресурс]. – К. : Міненерговугілля України, 2017. – 617 с. – Режим доступу: https://enext.ua/upload/books/pueh_ukraina_2017.pdf (дата звернення: 28.05.2026).

37. Державні санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень [Електронний ресурс] : ДСН 3.3.6.042-99. – Чинні від 1999-12-01. – К. : МОЗ

України, 1999. – Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/va042282-99> (дата звернення: 28.05.2026).

38. Охорона праці та цивільний захист [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра спеціальностей 132 «Матеріалознавство» та 136 «Металургія» / О. Г. Левченко. – Електронні текстові дані. – К. : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2025. – 337 с. – Режим доступу: <https://ela.kpi.ua/server/api/core/bitstreams/fe83100e-01d8-4eb6-8875-76bda19a2407/content> (дата звернення: 04.06.2026).