

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ



О.М. Доній В.В. Христенко Ю.В. Яворський

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ МЕТАЛЕВИХ МАТЕРІАЛІВ КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Навчальний посібник

Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів ступеня магістра
за освітньою програмою «Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві»
спеціальності 132 Матеріалознавство

Укладачі: О.М. Доній, В.В. Христенко, Ю.В. Яворський



Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2024

УДК 519.6:536:538.9:548:544.01:620:669 (075)

Д 11

Укладачі: *Доній Олександр Миколайович*, д. т. н., проф.
Христенко Вадим Володимирович, к. т. н, доц.
Яворський Юрій Васильович, к. ф.-м. н, доц.

Рецензент *Степанов О. В.*, к.т.н, доц., кафедра високотемпературних матеріалів та порошкової металургії, НН ІМЗ ім. Є.О. Патона, КПІ ім. Ігоря Сікорського.

Відповідальний редактор *Карпець М.В.*, д.ф-м.н, проф., кафедра фізичного матеріалознавства та термічної обробки, НН ІМЗ ім. Є.О. Патона, КПІ ім. Ігоря Сікорського.

*Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 8 від 20.06.2024 р.)*

*за поданням Вченої ради НН Інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є.О.
Патона (протокол № 7/24 від 12.06.2024 р.)*

Д 11 **Комп'ютерне моделювання структури металевих матеріалів.** Комп'ютерний практикум. [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеня магістра за освіт. програмою «Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві» спец. 132 Матеріалознавство / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: О.М. Доній, В.В. Христенко, Ю.В. Яворський. – Електрон. текст. дані (1 файл). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 153 с.

Комп'ютерне моделювання є сучасним та ефективним методом наукових досліджень. Первинна структура металевих матеріалів формується при кристалізації і вона суттєво впливає на їх властивості в твердому стані. Математичний опис таких процесів надто складний. Тому застосування методів комп'ютерного моделювання та створення комп'ютерних моделей дозволяє досліджувати особливості процесів структуроутворення у виливках при кристалізації та свідомо підійти до удосконалення промислових технологій. Посібник «Комп'ютерне моделювання структури металевих матеріалів» написаний у відповідності до програми (силабусу) дисципліни «Комп'ютерне моделювання структури металевих матеріалів» для студентів інженерних, технічних та технологічних напрямів підготовки і спеціальностей вищих навчальних закладів України III–IV рівнів акредитації. Крім студентів матеріалознавчих спеціальностей, посібник буде корисний для аспірантів, наукових працівників фізичних факультетів університетів і фахівців інших технічних спеціальностей, які у своїй діяльності зв'язані з науковими дослідженнями, розробкою промислових технологій, тощо.

УДК 519.6:536:538.9:548:544.01:620:669 (075)

Реєстр. № НП 22/23–263 Обсяг 6,9 авт. арк.
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
проспект Перемоги 37, м. Київ, 03056
<https://kpi.ua>

Свідцтво про внесення до Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5354 від 25.05.2017 р.

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024

ПЕРЕДМОВА

Швидкий розвиток техніки потребує всебічного аналізу і розробки складних процесів і технологій. При цьому від спеціаліста вимагаються не тільки глибоке розуміння сучасних технологій, але і вміння надавати конкретні рекомендації щодо оптимального керування ними. Моделювання є одним із методів наукових досліджень, його широко застосовують в таких царинах як математика, фізика, астрономія, хімія тощо. Будь-який розрахунок (навіть найелементарніший) пов'язаний із застосуванням моделей. Тому фахівець в ході інженерної діяльності зобов'язаний знати і усвідомлено застосовувати моделювання.

Комп'ютерне моделювання на сучасному етапі розвитку суспільства стає універсальним інструментом наукових досліджень, проникаючи в області, що традиційно будувалися на суто експериментальній основі і спостереженнях. Комп'ютерні експерименти стають фундаментом для розробки та удосконалення виробничих технологій, тим самим сприяючи підвищенню ефективності виробництва.

З огляду на універсальність основ моделювання і математичних прийомів, які наведені в даному посібнику, ці методи можна з успіхом застосовувати в багатьох галузях науки і техніки.

Цикл комп'ютерних практикумів з дисципліни “Комп'ютерне моделювання структури металевих матеріалів” спрямований на формування у студентів уміння практичного застосування засвоєного теоретичного матеріалу. А саме:

- виявляти та формулювати проблеми в сфері матеріалознавства, приймати ефективні рішення для їх вирішення;
- на відповідному рівні планувати та здійснювати дослідження в сфері матеріалознавства в лабораторних та виробничих умовах із застосуванням сучасних методів і методик експерименту;
- розробляти нові методи і методики досліджень, базуючись на знанні методології наукового дослідження та особливостях вирішуваної проблеми;
- усвідомлено застосовувати математичні та числові методи моделювання властивостей, явищ та процесів.

На практичних заняттях обов'язковим є самостійне виконання індивідуальних завдань.

Перед кожним комп'ютерним практикумом студент повинен опрацювати теоретичний матеріал за конспектом лекцій, рекомендованою літературою та теоретичними відомостями, що викладені у методичних

вказівках. В ході підготовки студент із наведеного у методичному посібнику списку літератури обирає ті видання, що є наявними у бібліотеці або мережі інтернет та більш доступні йому за рівнем викладання.

Звіт по кожному із практичних занять повинен відповідати змісту, що наведений у методичних вказівках. Він має включати вирішення відповідного індивідуального завдання і оформлюється згідно із прийнятими вимогами. Звіт виконується на аркушах паперу формату А4 (210×297 мм) або споживчого формату, що близький до формату А4. Усі записи слід робити чорнилом або пастою одного кольору, на одній стороні аркуша. Необхідні графічні побудови виконуються олівцем на одній стороні аркуша.

Оформлення звіту також можна виконувати в середовищі Word. Шрифт – Times New Roman, 12 кегль, 1,0 інтервал між рядками, вирівнювання – з двох сторін.

Заповнені аркуші звіту брошуруються в загальній обкладинці з титульним аркушем. На титульному аркуші вказується позначення звіту згідно до вимог. Викладач, приймаючи звіт з виконаної роботи, з'ясовує ступінь розуміння студентом суті роботи, засвоєння теоретичного матеріалу і ставить відповідну оцінку.

Для виконання комп'ютерних практикумів необхідний: комп'ютер зі встановленими ОС не нижче MS Windows 95 та пакетом офісних програм не нижче MS Office 97.

Комп'ютерний практикум № 1

МОДЕЛЮВАННЯ НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ - 1

Мета роботи: освоєння принципів розрахунків тривалості нагрівання металевого виробу за допомогою комп'ютерної програми.

Теоретичні відомості

Термічна обробка дає змогу отримати необхідні структуру і властивості матеріалу. Загалом вона полягає у зміні температури оброблюваної заготовки за відповідним алгоритмом. Одними із найважливіших технологічних параметрів термічної обробки є температура і тривалість нагрівання. Для визначення тривалості нагрівання металевого виробу можна застосувати математичне моделювання [1].

Розглянемо випадок нагрівання металеві деталі малого розміру, яка має вигляд тонкого циліндра, у якого довжина (l) значно перевищує його радіус (r_0) $r_0 \ll l$. З достатньою точністю можна вважати, що перепад температури (градієнт) по перерізу такої заготовки малий. Це дозволяє виключити з математичної задачі просторові координати і вважати, що температура деталі (T) є функцією тільки тривалості нагрівання (t).

Вочевидь, неоднорідність внутрішньої структури матеріалу деталі (наприклад, сталі) не буде грати істотної ролі в процесі ході нагрівання, тому для спрощення математичної постановки задачі будемо вважати матеріал ізотропним. Таким чином, заготовку можна представити у вигляді "матеріальної точки", яка характеризується такими показниками, як маса (m), питома теплоємність (c) та площа поверхні (S). Ці характеристики відіграють важливу роль при нагріванні. Через поверхню відбувається теплообмін деталі з простором печі, а загальна теплоємність деталі визначається як добуток її маси на питому теплоємність матеріалу. Простір в печі має певну температуру (T_f).

Теплопередача від навколишнього середовища до тіла, що нагрівається, відбувається за механізмом теплопровідності (теплообмін), або за допомогою випромінювання (радіації). Математичну модель нагрівання циліндра можна побудувати, із застосуванням відомих феноменологічних законів Ньютона-Рихмана і Стефана-Больцмана (випромінювання).

Основним співвідношенням математичної моделі є рівняння балансу енергії: кількість тепла, яке поглинається заготовкою (dQ_c) дорівнює кількості тепла, яку віддає нагрівальне середовище (dQ_f), тобто

$$dQ_c = dQ_f. \quad (1.1)$$

Вважатимемо, що теплообмін циліндра з простором печі відбувається за законом Ньютона-Ріхмана, тобто променевим теплообміном знехтуємо. Це спрощує об'єкт моделювання, хоча, строго кажучи, його справедливність залежить від температури печі T_f та ступеня чорноти поверхні виробу.

Тоді, відповідно до закону Ньютона-Ріхмана:

$$dQ_f = \alpha S [T_f - T(t)] dt, \quad (1.2)$$

де: $T(t)$ - температура заготовки в ході нагрівання [K]; α - коефіцієнт тепловіддачі від простору печі до поверхні заготовки [Дж/(м²·К·с)]; S - площа поверхні виробу [м²]; t - час [с].

Кількість теплоти, яка йде на нагрівання заготовки (поглинається заготовкою) можна визначити, застосовуючи відоме калориметричне співвідношення:

$$dQ_c = cm dT(t), \quad (1.3)$$

де: c - питома теплоємність металу [Дж/(кг·К)]; m - маса металу [кг].

Підставляючи вирази (1.2) і (1.3) у рівняння (1.1), після елементарних перетворень рівняння теплового балансу приймає вигляд:

$$\frac{dT(t)dt}{dt} = \frac{\alpha S}{cm} [T_f - T(t)]. \quad (1.4)$$

Маса заготовки в ході нагрівання не змінюється, а незначною зміною розмірів поверхні, яка пов'язана з розширенням тіла при підвищенні температури, можна знехтувати.

Відомо, що теплоємність матеріалів залежить від температури, однак для спрощення задачі будемо вважати її постійною. Коефіцієнт тепловіддачі α також будемо вважати постійним, хоча це досить складний параметр. Тобто $c = \text{const}$, $\alpha = \text{const}$

Вираз (1.4) являє собою диференціальне рівняння першого порядку з постійними коефіцієнтами, яке виражає швидкість зміни температури $\frac{dT(t)}{dt}$. Зокрема, з (1.4) випливає, що на початку процесу швидкість нагрівання $\frac{dT(t)}{dt}$ має максимальну величину, пропорційну різниці $T_f - T_0$. Потім швидкість нагрівання зменшується, адже підвищується температура деталі $T(t)$. Крім того, якщо масу деталі виразити через густину матеріалу і її об'єм, (тобто $m = \rho V$), то буде очевидним, що швидкість нагрівання також залежить від комплексного геометричного параметра $\frac{S}{V}$, величина якого залежить не тільки від розмірів, але і від конфігурації виробу. Слід зазначити, що при інженерних розрахунках тривалості нагрівання реальних деталей застосовують таку характеристику, як геометричний показник виробу. Він являє собою відношення об'єму деталі до площі її поверхні: $W = \frac{V}{S}$.

Для інтегрування рівняння (1.4) запишемо його в такому вигляді:

$$\frac{dT(t)}{T_f - T(t)} = \frac{\alpha S}{cm} dt. \quad (1.5)$$

Відповідно до задачі Коші, для отримання єдиного розв'язку, рівняння (1.5) необхідно доповнити початковою умовою. Ця умова очевидна – температура заготовки в момент часу, який відповідає початку нагрівання $t = 0$, дорівнює початковій температурі T_0 :

$$T(0) = T_0. \quad (1.6)$$

Задача (1.5) – (1.6) розв'язується аналітично за допомогою безпосереднього інтегрування лівої і правої частин рівняння (1.5). Після врахування граничної умови (1.6) одержимо розв'язок задачі (1.5) - (1.6):

$$T(t) = T_f - (T_f - T_0) \exp(-kt), \quad (1.7)$$

де

$$k = \frac{\alpha S}{cm}. \quad (1.8)$$

Вираз (1.7) є інтегральною моделлю нагрівання при прийнятих обмеженнях і спрощеннях. Дане рівняння дає наближений аналітичний опис кінетики нагрівання за умови достатньо обґрунтованих припущень у постановці задачі. Деякі неточності, які притаманні даній моделі, можна легко обійти, якщо не потрібна підвищена точність розрахунків. Наприклад, аналіз виразу (1.7) показує, що в ході нагрівання температура заготовки $T(t)$ поступово наближається до температури печі T_f , тому що при збільшенні тривалості нагрівання t експонента зменшується. Але формальна рівність $T(t) = T_f$ виконується, коли експонента асимптотично наближається до нуля ($\exp(-kt) \rightarrow 0$), а тривалість процесу наближається до безкінечності, тобто $t = \infty$ (рис. 1). Інакше кажучи, температура заготовки досягне температури печі при нескінченно довгому нагріванні. Така, дещо абсурдна ситуація виникає, як наслідок припущень і спрощень, які були зроблені при формулюванні

ідеального об'єкта (моделі процесу). А саме йому відповідає математичне формулювання моделі. В той же час, практика показує, що температури вирівнюються за кінцевий проміжок часу. Вихід з цієї ситуації дуже простий. Якщо потрібно розрахувати тривалість нагрівання t_n , то, за допомогою математичної моделі (1.7), визначаємо t_n у момент коли

$$T_k(t_n) = BT_f, \quad (1.9)$$

де T_k - температура закінчення розрахунків; $B = (1 - 0,01\Delta T)$ - коефіцієнт, який зумовлений точністю вимірювання температури в печі. Якщо температура визначається з похибкою $\Delta T = 5\%$, то $B = 0,95$.

Сенс (1.9) полягає в тому, що вимірювання температури в печі завжди виконується з певною точністю, тому і немає потреби вести розрахунки тривалості нагрівання t_n саме до T_f , а достатньо досягти межі $T_k = T_f - 0,01\Delta \times T_f$ або BT_f . Таким чином нескінченний “хвіст” експоненти, який асимптотично наближається до T_f , “відрізається” (рис. 1.1).

Щоб визначити тривалість нагрівання заготовки, із виразу (1. 7) потрібно виділити змінну t . Для цього запишемо (1.7) інакше:

$$\exp(-kt) = \frac{T_f - T(t)}{T_f - T_0}. \quad (1.10)$$

Логарифмуючи (1.10) отримаємо:

$$t_n = -\frac{1}{k} \ln \left(\frac{T_f - T_k}{T_f - T_0} \right). \quad (1.11)$$

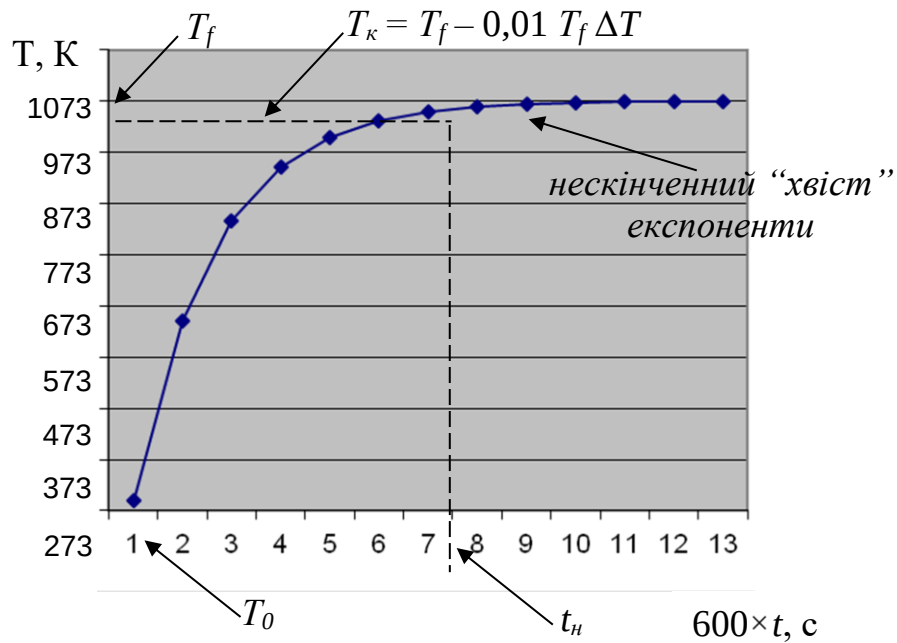


Рис. 1.1. Зміна температури заготовки $T(t)$ із часом нагрівання t . T_f – температура печі, К; T_0 – початкова температура, К; ΔT – похибка вимірювання температури, %; T_k – температура закінчення розрахунків; t_n – тривалість нагрівання, с

Приклад розрахунку тривалості нагрівання заготовки в печі.

Задано: температура печі $T_f = 1073$ К (800 °С), початкова температура $T_0 = 293$ К (20 °С), коефіцієнт $k = 10^{-3}$ 1/с (всі розрахунки слід здійснювати в системі СІ). Похибка вимірювання температури $\Delta T = 5\%$. Потрібно розрахувати тривалість нагрівання заготовки t_n .

Спочатку визначимо температуру кінця розрахунків $T_k = BT_f = 0,95 \times 1073$ К (800 °С) = 1019 К (точний результат становить 1019,35 проте має сенс вести розрахунки з точністю в 1 градус). Далі підставляємо в (1.11) всі числові дані і отримуємо

$$t_n = -\frac{1}{0,001} \ln \left(\frac{1073 - 1019}{1073 - 293} \right) \cong 2670 \text{ с.}$$

Таким чином тривалість нагрівання в даному прикладі складає приблизно 2670 секунд або 45 хвилин.

Якщо параметри моделей даного типу залежать від температури (що має місце в даному випадку), то для розрахунків застосовують значення, розраховані для температури середини інтервалу нагрівання $\bar{T} = \frac{T_k - T_0}{2}$.

При виконанні розрахунків (і не тільки в даному практикумі) краще користуватись програмними (комп'ютерними) засобами. Комп'ютерні розрахунки займають менше часу та мають високу надійність. Тому в практикумі передбачено створення комп'ютерної програми, алгоритм якої наведено на рис.1.2. В блоках 1, 3, 5, 7 алгоритму вводяться необхідні для розрахунків дані. В блоках 2, 4, 6, 8 відповідно обчислюються:

- середнє значення температурного інтервалу нагрівання;
- питома теплоємність;
- площа поверхні заготовки S , її об'єм V та маса.

Ці параметри дають можливість розрахувати величину коефіцієнта k , який визначає швидкість (блок 9), та тривалість нагрівання t_n (блок 10). В блоці 11 передбачено вивід результату розрахунку тривалості нагрівання t_n . Для побудови графіка залежності температури від часу в ході нагрівання, розрахунки за формулою (1.7) виконуються в блоці 13, а їх результати виводяться в блоці 13.

Порядок виконання роботи

1. Розрахувати тривалість нагрівання заготовки t_n . Дані для розрахунків наведені в таблиці А.1 (додаток А). Для цього розробити комп'ютерну програму [2] за алгоритмом, представленим на рисунку 1.2 (мова програмування - довільна). Програма має забезпечувати визначення наступних величин:

а) середнє значення температурного інтервалу нагрівання

$$\bar{T} = \frac{T_k - T_0}{2};$$

б) значення питомої теплоємності для середини температурного інтервалу нагрівання $\bar{T}$. Для цього слід побудувати залежність питомої теплоємності від температури ($c = f(T)$), за даними, наведеними в таблиці А.2 (додаток А). За двома точками таблиці А.2 (температури 300 К та 800 К) з допомогою відомого рівняння прямої, яка проходить через дві точки, будується лінійна апроксимація залежності $c = f(T)$:

$$\frac{c - c_1}{c_2 - c_1} = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}, \quad (1.12)$$

де c_1, c_2, T_1 та T_2 – значення відповідно питомої теплоємності та температури з таблиці А.2 (додаток А).

Після підстановки числових значень в рівняння (1.12), його потрібно звести до вигляду:

$$c = a_0 + a_1 T, \quad (1.13)$$

де a_0 та a_1 – коефіцієнти.

Середня величина питомої теплоємності $\bar{c}$ визначається шляхом підстановки середнього значення інтервалу температур $\bar{T}$ в (1.13).

в) площу поверхні заготовки S , її об'єм V та маса. Маса заготовки визначається як добуток густини ρ на об'єму V :

$$m = \rho V. \quad (1.13)$$

Середні значення густини для Al та Cu наведені в таблиці А.2 (додаток А).

Площа поверхні заготовки S та її об'єм V визначається за відомими співвідношеннями, залежно від геометрії і розмірів (таблиця А.3 додаток А);

г) значення коефіцієнта k з формулою (1.8);

д) тривалість нагрівання за виразом (1.11);

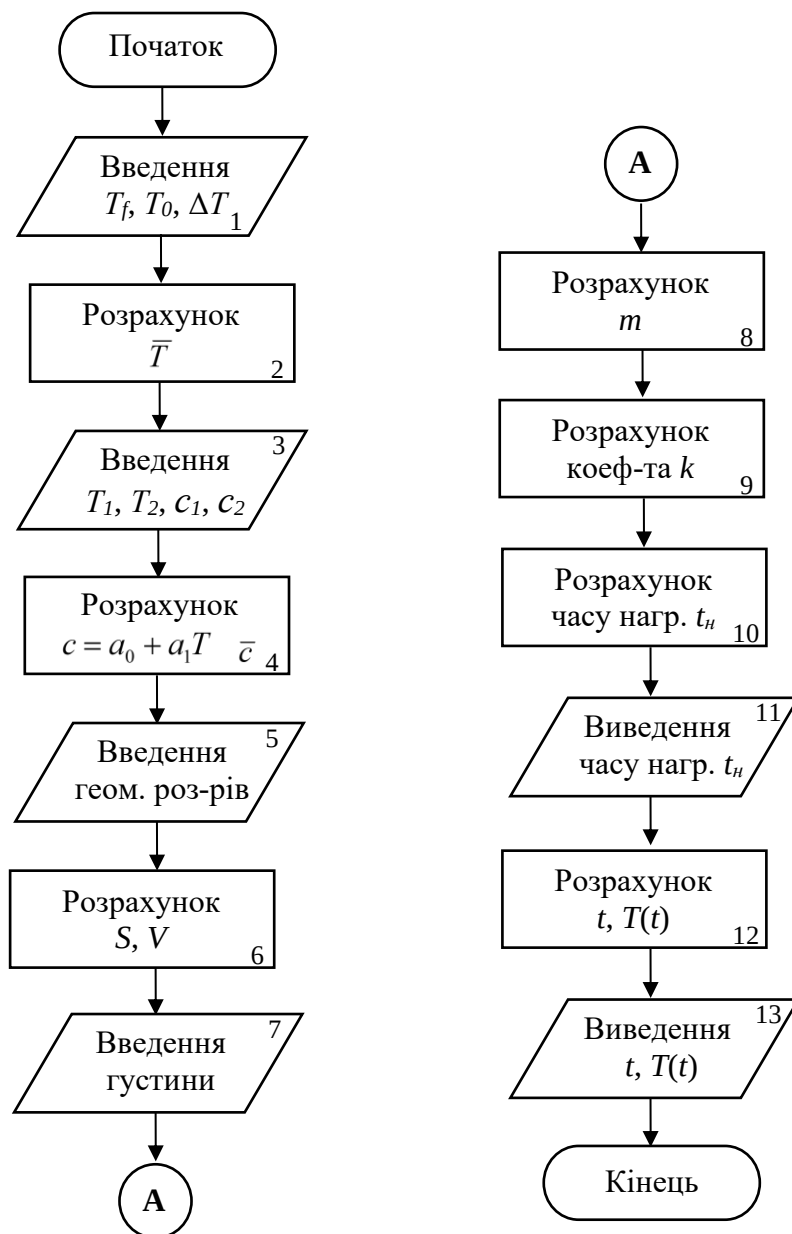


Рис. 1.2. Алгоритм комп'ютерної програми для розрахунку тривалості нагрівання заготовки t_n та залежності температури від часу в ході нагрівання

2. Побудувати графік залежності температури від часу в ході нагрівання, застосовуючи для цього математичну модель (1.7) - (1.8). Побудувати криву нагрівання.

3. Сформулювати висновки по роботі.

4. Оформити звіт.

Вимоги до оформлення індивідуального протоколу роботи

Необхідно представити результати розрахунків, текст програми та графік зміни температури в часі.

Контрольні запитання

1. Яким чином можна корегувати структуру і властивості металевих матеріалів?
2. Які припущення приймаються при побудові математичної моделі нагрівання металевої заготовки?
3. Які існують механізми передачі тепла і якими законами вони описуються?
4. Що являє собою задача Коші і який сенс має додаткова умова?
5. Що являє собою геометричний показник виробу?
6. Чому потрібно враховувати похибку вимірювання температури при розрахунках тривалості нагрівання?

Комп'ютерний практикум № 2

МОДЕЛЮВАННЯ НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ - 2

Мета роботи: освоєння принципів розрахунків тривалості нагрівання металевого виробу за допомогою комп'ютерної програми, яка реалізує чисельний метод Ейлера розв'язування звичайних диференціальних рівнянь першого порядку.

Теоретичні відомості

Математичну модель (дивись комп'ютерний практикум № 1) можна уточнити, якщо змінити деякі спрощення, які були зроблені при її побудові. Наприклад, температура нагрівання в ході гартування залежить від матеріалу виробу і, наприклад для вуглецевої сталі, перебуває в межах 1000 °С. В інтервалі температур від 20 градусів до 1000 градусів теплоємність сталі змінюється на 20 – 30 %. При високих температурах істотна частка тепла передається випромінюванням. Тому для збільшення точності моделі можна, по перше, врахувати залежність питомої теплоємності від температури $c = f(T)$, а, по друге, також врахувати радіаційний механізм теплопередачі (закон Стефана-Больцмана).

Залежність теплоємності від температури $c = f(T)$ зазвичай описують за допомогою апроксимацій. Однією з найбільш вживаних є апроксимація степеневим поліномом Келлі. Так у довідниках наводяться температурні залежності питомих теплоємностей речовин у вигляді $c_p(T) = a + bT + cT^{-2} + dT^2$. Значення коефіцієнтів a , b , c і d наводяться в таблицях. На практиці часто достатньо застосувати квадратичну апроксимацію. Проте в даній роботі для спрощення розрахунків можна обмежитися і більш простою лінійною апроксимацією:

$$c_p(T) = a_0 + a_1 T, \quad (2.1)$$

де: a_0, a_1 - емпіричні коефіцієнти, значення яких визначено в комп'ютерному практикумі № 1.

При врахуванні як конвективної, так і радіаційної теплопередачі кількість поглиненого від печі тепла dQ_f описується законом повної тепловіддачі:

$$dQ_f = \alpha S [T_f - T(t)] dt + \sigma \varepsilon S [T_f^4 - T^4(t)] dt, \quad (2.2)$$

де: σ - постійна Стефана-Больцмана; $0 < \varepsilon < 1$ - ступінь чорноти поверхні заготовки; α - коефіцієнт тепловіддачі від простору печі до поверхні заготовки [Дж/(м²·К·с)]; S - площа поверхні виробу [м²]; t - час [с].

Рівняння теплового балансу із початковою умовою в цьому випадку приймає такий вигляд:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{k_1 [T_f - T(t)] + k_2 [T_f^4 - T^4(t)]}{a_0 + a_1 T(t)}, \quad (2.3)$$

$$T(0) = T_0 \quad (2.4)$$

де

$$k_1 = \frac{\alpha S}{m}, \quad (2.5)$$

$$k_2 = \frac{\sigma \varepsilon S}{m}. \quad (2.6)$$

Вираз (2.3) класифікується як звичайне нелінійне диференціальне рівняння. Воно значно повніше описує досліджувану систему, однак його

аналітичного розв'язку не існує. Тому в цьому випадку для розв'язання слід застосувати чисельний метод [3].

Найпростішим чисельним методом розв'язку подібних рівнянь є метод Ейлера. Так задача Коші для диференційного рівняння першого порядку формулюється таким чином:

$$y' = f(x, y), \quad (2.7)$$

$$y(x_0) = y_0, \quad (2.8)$$

де (2.8) має фізичний зміст початкової умови.

Розв'язком диференціального рівняння є функція. При застосуванні чисельного методу вона буде подана у вигляді таблиці. При побудові такої таблиці потрібно вказати інтервал зміни аргументу x цієї функції $[x_0, x_N]$. Також необхідно вибрати крок $h = const$, з яким буде змінюватись аргумент x на цьому інтервалі. Тобто розв'язок має вигляд таблиці 2.1.

Причому перший рядок таблиці 2.1 вже відомий. Ця точка з номером $i = 0$ є додатковою (початковою) умовою (1.2) в задачі Коші.

В основі методу Ейлера лежить розкладання функції в ряд Тейлора в малій ε -околиці точки x_i . Цей ряд має вигляд:

$$y(x_0) = y(x_0) + \varepsilon y'(x_0) + \frac{\varepsilon^2}{2!} y''(x_0) + \frac{\varepsilon^3}{3!} y'''(x_0) + \dots \quad (2.9)$$

Таблиця 2.1. Чисельний розв'язок диференціального рівняння у табличному вигляді

i	x_i	y_i
0	x_0	y_0
1	x_1	y_1
2	x_2	y_2
...	...	...
N	x_N	y_N

В знаменниках коефіцієнтів виразу (2.9), що розташовані перед похідними, стоять факторіали – функції, значення яких дуже швидко зростають. Тобто можна говорити про те, що значення цих коефіцієнтів швидко зменшуються до нуля. Враховуючи цей факт, можна обмежитись членами ряду до похідної першого порядку включно (тобто враховувати перші два члени ряду):

$$y(x_0) \cong y(x_0) + \varepsilon y'(x_0) . \quad (2.10)$$

Для таблиці 2.1 крок h можна вважати ε -околицею (тобто $h = \varepsilon$), тому неважко визначити, що

$$y(x_0) = y_0, \quad (2.11)$$

$$y(x_0) = y(x_0 + h) + \varepsilon y + y_1. \quad (2.12)$$

Підставляючи (2.11) та (2.12) в (2.10) та враховуючи, що $y'(x_0)$ це є права частина рівняння (2.7) в точці x_0 (тобто $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$) отримуємо:

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0). \quad (2.13)$$

Таким чином знаючи x_0 та y_0 з початкової умови (2.8) і розрахувавши значення правої частини вихідного рівняння (2.7) в цих точках $f(x_0, y_0)$ отримуємо за допомогою (2.13) нове значення y_1 , яке і заносимо до таблиці 2.1.

Повторюючи ці дії відносно точки x_1 таким же чином можна отримати:

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) , \quad (2.14)$$

або в загальному вигляді:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) . \quad (2.15)$$

Загальна ітераційна формула (2.15) для чисельного розв’язку задачі (2.7) – (2.8) дозволяє за відомими значеннями аргументу x_i і функції y_i на i -тому кроці знайти значення функції y_{i+1} на наступному $i+1$ -ому кроці. Таким чином розраховуються значення функції у всіх точках таблиці 2.1, яка і є розв’язком задачі Коші. Точність методу залежить від вибору кроку розрахунків. Чим менший крок, тим точність вища.

При застосуванні методу Ейлера, ітераційна формула для рівняння (2.3) має вигляд:

$$T_{i+1} = T_i + hf(t_i, T_i), \quad (2.16)$$

Або, підставляючи в (2.16) замість $f(t_i, T_i)$ праву частину рівняння (2.3), вона буде:

$$T_{i+1} = \frac{k_1[T_f - T_i] + k_2[T_f^4 - T_i^4]}{a_0 + a_1 T_i}. \quad (2.17)$$

Розв’язок задачі (2.3) – (2.4) після завершення обчислень буде мати вигляд:

Таблиця 2.2. Чисельний розв’язок диференціального рівняння (2.3)
у табличному вигляді

i	t_i	T_i
0	t_0	T_0
1	t_1	T_1
2	t_2	T_2
...	...	...
N	t_N	T_N

Тут перший рядок є додатковою умовою (2.4).

Приклад розв'язку задачі (2.3) – (2.4) методом Ейлера

Припустимо, що діаметр заготовки, що нагрівається, $D = 3$ см, а довжина $l = 1$ м. Тоді не важко обчислити її поверхню $S = 2\pi Rl + 2\pi R^2$ або $S \approx 0,095$ м² та об'єм $V = \pi R^2 l$ чи $V \approx 7,069 \cdot 10^{-4}$ м³. Заготовка зроблена зі сталі, густина якої $\rho = 7870$ кг/м³, а її маса становить $m = \rho V \approx 5,56$ кг. Ступінь чорноти поверхні умовно вибираємо $\varepsilon = 0,5$. Нагрівання починається від 20 °С (або 293 К), температура печі 1000 °С (або 1273 К), похибка вимірювання температури $\Delta = 5\%$. Тоді температура закінчення розрахунків 995 °С (або 1268 К), що визначається таким же чином, як в Комп'ютерному практикумі № 1. Постійна Стефана-Больцмана $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Дж/с·м²·К⁴), коефіцієнт тепловіддачі $\alpha = 10$ Дж/(с·м²·К). Тоді числові значення коефіцієнтів k_1, k_2 у відповідності до (2.5) та (2.6) будуть: $k_1 = 0,172$ Дж/(с·кг·К), а $k_2 = 4,875 \cdot 10^{-10}$ Дж/(с·кг·К⁴).

Залежність теплоємності від температури в діапазоні 300 - 1000 К можна апроксимувати лінійною залежністю за даними, які наведені у довіднику [2]:

$$c(T) = 202,1 + 2,143T \text{ [Дж/(кг · К)]}. \quad (2.18)$$

Ітераційна формула (2.17) набуває вигляду:

$$T_{i+1} = T_i + h \frac{0,172 \cdot [1273 - T_i] + 4,875 \cdot 10^{-10} \cdot [1273^4 - T_i^4]}{202,1 + 2,143 \cdot T_i}. \quad (2.19)$$

Для обчислень виберемо крок за часом $h = 10$ секунд. Значення функції $T(t)$, які обчислюються за допомогою виразу (2.19), заносяться в до таблиці 2.3. У перший стовпчик таблиці заноситься номер ітерації, у другий - час нагрівання. Третій і четвертий стовпчики містять температуру зразка,

що нагрівається, відповідно, у Кельвінах і градусах Цельсія. Значення температури в розрахунку за (2.19) беруться з третього стовпчика, а четвертий - служить для ілюстрації динаміки нагрівання в більш звичному вигляді.

Перший рядок ($i = 0$), як зазначалось, являє собою початкову умову (2.4), її записуємо в таблицю без обчислень. Застосовуючи формулу (2.19) заповнюємо другий рядок ($i = 1$), при цьому як T_0 береться значення температури з попереднього рядка $i = 0$ (третій стовпчик):

$$T_1 = 293 + 10 \cdot \frac{0,172 \cdot [1273 - 293] + 4,875 \cdot 10^{-10} \cdot [1273^4 - 293^4]}{202,1 + 2,143 \cdot 293}. \quad (2.20)$$

Отримане значення $T_1 = 340$ записуємо до таблиці 3.2. Таким же чином визначаємо температуру в наступному рядку $i = 2$:

$$T_2 = 340 + 10 \cdot \frac{0,172 \cdot [1273 - 340] + 4,875 \cdot 10^{-10} \cdot [1273^4 - 340^4]}{202,1 + 2,143 \cdot 340}. \quad (2.21)$$

Аналогічно розраховуються всі наступні температури. У таблиці 2.3 наведена динаміка температури зразка, що нагрівається, за першу хвилину з інтервалом 10 секунд.

Точність розрахунків залежить від величини кроку за часом. Чим він менший, тим точнішими будуть розрахунки.

Подібні розрахунки зручно виконувати з допомогою комп'ютерної програми. На рис. 2.1 наведено алгоритм числового розв'язання задачі (2.3) – (2.4) про нагрівання заготовки для термічної обробки, у якому передбачено послідовне (із кроком h) обчислення температури $T(t)$ методом Ейлера. Завершуються обчислення після досягнення заданої температури T_k . В алгоритмі передбачено розрахунок операційних констант (S , V , m , k_1 , k_2).

Таблиця 2.3. Розраховані значення температури заготовки
в процесі його нагрівання

i	t, с	T, °K	T, °C
0	0	293	20
1	10	324	51
2	20	354	81
3	30	384	111
4	40	414	141
5	50	443	170
6	60	472	199

У блок 1 вводяться вхідні дані для розрахунку:

- початкова температура (T_0);
- температура печі (T_p);
- температура кінця розрахунків (T_k);
- коефіцієнт тепловіддачі (α);
- постійна Стефана-Больцмана (σ);
- ступінь чорноти поверхні (ϵ);
- густина матеріалу валу (ρ);
- коефіцієнти апроксимації (a_0, a_1);
- геометричні розміри, залежно від геометрії заготовки (довжина (l_1), ширина (l_2) і висота (l_3) заготовки, або її діаметр (d) і довжина (l), або діаметр (d)); крок розрахунку за часом (h).

У блоці 2 розраховуються площа поверхні (S), об'єм (V) і маса (m) заготовки, а також коефіцієнти k_1, k_2 .

Необхідні для розрахунку лічильники вводяться в блок 3. Тут i - лічильник ітерацій, j - часовий лічильник для виводу інформації, t - тривалість нагрівання. N_p вказує через який проміжок часу нагрівання (у секундах) робити вивід результатів на екран або на друк. Також у даному блоці задається перше значення температури для початку обчислень ($Tt = T_0$).

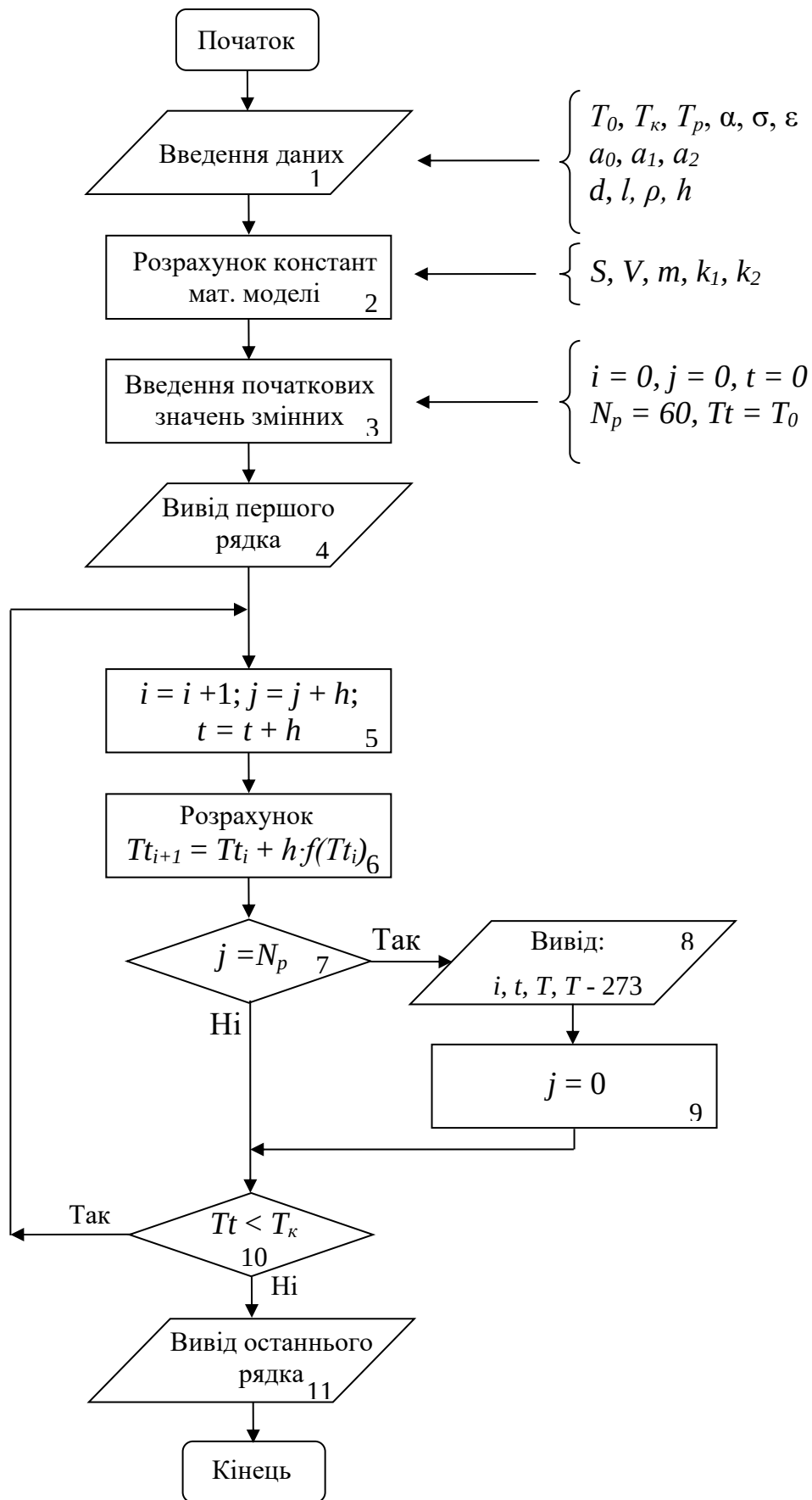


Рис. 2.1. Блок-схема алгоритму комп'ютерних розрахунків математичної моделі методом Ейлера

Порядок виконання роботи

Застосовуючи метод Ейлера розрахувати тривалість нагрівання заготовки t_n , враховуючи радіаційну складову теплопередачі та залежність питомої теплоємності від температури. Дані для розрахунків такі ж, що були в комп'ютерному практикумі №1 і наведені в таблиці А.1 (додаток А). Для проведення розрахунків потрібно:

1. Проаналізувати алгоритм числового розв'язання задачі (2.3) – (2.4) про нагрівання заготовки для термічної обробки.

2. Скласти комп'ютерну програму, для його реалізації [2] (мова програмування довільна).

3. Перевірити правильність комп'ютерної програми на контрольному прикладі.

4. Розрахувати тривалість нагрівання заготовки t_n та побудувати графік залежності температури від часу в ході нагрівання при:

а) $a_0 = c$, [Дж(кг·К)] (значення c розраховано в комп'ютерному практикумі №1);

$$a_1 = 0;$$

$$\varepsilon = 0.$$

б) a_0 та a_1 мають значення, які розраховані в комп'ютерному практикумі №1;

$$\varepsilon = 0.$$

в) a_0 та a_1 мають значення, які розраховані в комп'ютерному практикумі №1;

$$\varepsilon = 0,7.$$

Рекомендований крок розрахунків $h = 1$ секунда. Дані для розрахунків задані в комп'ютерному практикумі №1.

Пункт 4 а) виконується для порівняння результатів обчислень, отриманих при аналітичному розв'язку рівняння теплового балансу (1.7) та чисельним методом Ейлера. Розрахунки в пункті 4 б) показують вплив

залежності питомої теплоємності від температури на динаміку процесу нагрівання, а у пункті 4 в) враховується нагрівання випромінюванням.

5. Побудувати графіки залежності температури від часу для всіх варіантів розрахунків (графіки будувати на одній координатній площині рисунку).

6. Проаналізувати отримані результати, порівняти отримані результати із результатами комп'ютерного практикуму № 1 та сформулювати висновки по роботі.

7. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Які існують механізми передачі тепла? Якими законами вони описуються?

2. Що лежить в основі метода Ейлера для розв'язку звичайних диференціальних рівнянь першого порядку?

3. Від чого залежить точність розрахунків методом Ейлера при розв'язку звичайних диференціальних рівнянь першого порядку?

МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ. ФАКТОРНІ ПЛАНИ ПЕРШОГО ТА ДРУГОГО ПОРЯДКІВ

Мета роботи: освоєння методів створення комп'ютерних моделей на базі експериментальних даних. Опанування багатовимірного методу найменших квадратів та методик реалізації факторних експериментів.

Теоретичні відомості

В практичній діяльності часто виникає необхідність удосконалення наявних та розробки нових технологій і матеріалів. Переважна більшість таких завдань вирішується за допомогою експериментальних методів: за результатами експериментальних досліджень формують висновки, які в подальшому стануть основою майбутніх здобутків. В таких випадках результати експериментів зручно подавати у вигляді математичних моделей, побудованих за допомогою комп'ютерних технологій. Такі моделі зручно будувати із застосуванням регресійного аналізу, основою якого є *метод найменших квадратів* (МНК) [3]. Фактично побудова моделі є апроксимацією експериментальних даних відповідними математичними залежностями. Основна ідея МНК полягає в мінімізації суми квадратів відхилень апроксимуючої залежності від експериментально визначених точок (принцип Лежандра). Метод найменших квадратів дозволяє реалізувати апроксимацію даних експерименту одновимірною і багатовимірною, як лінійною, так і нелінійною функціями.

Розглянемо загальний алгоритм цього методу для випадку апроксимації двовимірних функцій. Нехай в ході експерименту отримані дані, що записані у вигляді таблиці, яка складається із N точок:

$$(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3.1)$$

Апроксимуємо табличні дані залежністю, яка є лінійною комбінацією деяких базисних функцій $\varphi_i(x)$:

$$\phi(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \dots + c_m\phi_m(x), \quad (3.2)$$

де $c_0, c_1, \dots, c_m$ - коефіцієнти; $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_m(x)$ – деякі базисні функції.

На даному етапі вигляд базисних функцій визначати не будемо. Для того, щоб вираз (3.2) дійсно описував таблицю (3.1) потрібно визначити коефіцієнти $c_0, c_1, \dots, c_m$. Для цього запишемо принцип Лежандра у вигляді математичного співвідношення:

$$Q = \sum_{i=1}^N [\phi(x_i) - y_i]^2 \rightarrow \min, \quad (3.3)$$

де Q – сума квадратів відхилень значень апроксимуючої функції $\phi(x_i)$ від ординат y_i точок таблиці (3.1).

Підставляючи вираз (3.2) в формулу для визначення суми квадратів відхилень (3.3) отримуємо:

$$Q = \sum_{i=1}^N [c_0\phi_0(x_i) + c_1\phi_1(x_1) + c_2\phi_2(x_i) + \dots + c_m\phi_m(x_i) - y_i]^2 \rightarrow \min. \quad (3.4)$$

Базисні функції $\phi_j(x_i)$ (де $j = 0, 1, 2, \dots, N$) в виразі (3.4) є константами адже їх аргументи – це абсциси x_i точок таблиці (3.1), а функція фіксованого аргументу є певним числом. Тому можна стверджувати, що величина суми квадратів відхилень Q залежить від значень коефіцієнтів $c_0, c_1, \dots, c_m$. Чим вдалішим буде набір цих коефіцієнтів, тим меншими будуть відхилення апроксимуючої залежності від експериментальних точок.

Враховуючи вище зазначене зрозуміло, що сума квадратів відхилень Q є функцією від $m+1$ аргументів ($c_0, c_1, \dots, c_m$) і за принципом Лежандра потрібно знайти її мінімум:

$$Q = Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m) \rightarrow \min. \quad (3.5)$$

Задача (3.5) розглядається в розділі математичного аналізу для пошук екстремуму функції багатьох змінних. Умовою екстремуму (максимуму або мінімуму) функції багатьох змінних в даній точці, (*стаціонарна точка*) є рівність нулю її градієнта в цій точці. Слід нагадати, що “**Градiєнт**” – це вектор, який направлений у бік максимального зростання функції, компонентами якого є частинні похідні:

$$\vec{\nabla} y(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{\partial y}{\partial x_1} \vec{i}_1 + \frac{\partial y}{\partial x_2} \vec{i}_2 + \dots + \frac{\partial y}{\partial x_k} \vec{i}_k, \quad (3.6)$$

де $\frac{\partial y}{\partial x_j}$ - частинні похідні; $\vec{i}_j$ - одиничні вектори k -вимірного простору (орти), які задають напрямок градієнта.

Таким чином функція має екстремум у точці, для якої виконується умова:

$$\vec{\nabla} Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m) = 0. \quad (3.7)$$

Нагадаємо, що вектор є нульовим за умови, коли всі його компоненти дорівнюють нулю. Тому рівняння (3.7), яке записано в операторному вигляді, розпадається на систему рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Q}{\partial c_0} = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_1} = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_2} = 0, \\ \dots \dots \dots \\ \frac{\partial Q}{\partial c_m} \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Визначимо частинні похідні функції $Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m)$ за правилами диференціювання складних функцій і прирівняємо їх до нуля:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial c_0} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_0(x_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial c_1} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_1(x_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial c_2} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_2(x_i) = 0 \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{\partial Q}{\partial c_m} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_m(x_i) = 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Позбавимось двійок, які стоять перед знаком суми, поділивши обидві частини кожного із рівнянь на 2 і розкриємо дужки. Запишемо систему спрощено, не позначаючи в дужках аргументи функцій ϕ_j і опускаючи значки суми. Тобто коефіцієнти при невідомих $\sum_{i=1}^N \phi_j(x_i)\phi_k(x_i)$ запишемо спрощено, як $\phi_j\phi_k$. Члени $\sum_{i=1}^N \phi_j(x_i)u_i$ запишемо як $\phi_j u$. Після цього система рівнянь (3.9) набуває вигляду:

[illegible]

Тут члени із мінусом перенесені в праві частини рівнянь (з протилежним знаком). Система (3.10) являє собою систему лінійних

алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів c_i і її зручно подати у матричному вигляді:

$$\begin{pmatrix} \varphi_0\varphi_0 & \varphi_0\varphi_1 & \varphi_0\varphi_2 & \dots & \varphi_0\varphi_m \\ \varphi_1\varphi_0 & \varphi_1\varphi_1 & \varphi_1\varphi_2 & \dots & \varphi_1\varphi_m \\ \varphi_2\varphi_0 & \varphi_2\varphi_1 & \varphi_2\varphi_2 & \dots & \varphi_2\varphi_m \\ \\ \varphi_m\varphi_0 & \varphi_m\varphi_1 & \varphi_m\varphi_2 & \dots & \varphi_m\varphi_m \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ ... \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_0 y \\ \varphi_1 y \\ \varphi_2 y \\ ... \\ \varphi_m y \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Об'єднуючи матрицю коефіцієнтів з вектор-стовпчиком правої частини системи (3.11) отримаємо розширену матрицю:

$$\left(\begin{array}{cccccc|c} \varphi_0\varphi_0 & \varphi_0\varphi_1 & \varphi_0\varphi_2 & \dots & \varphi_0\varphi_m & \varphi_0Y \\ \varphi_1\varphi_0 & \varphi_1\varphi_1 & \varphi_1\varphi_2 & \dots & \varphi_1\varphi_m & \varphi_1Y \\ \varphi_2\varphi_0 & \varphi_2\varphi_1 & \varphi_2\varphi_2 & \dots & \varphi_2\varphi_m & \varphi_2Y \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_m\varphi_0 & \varphi_m\varphi_1 & \varphi_m\varphi_2 & \dots & \varphi_m\varphi_m & \varphi_mY \end{array} \right) \quad (3.12)$$

Ця розширена матриця (3.12) має назву “інформаційна матриця” або “матриця Грама”. Вона має такі властивості:

- симетричність елементів матриці відносно основної діагоналі, тобто $a_{ij} = a_{ji}$, це дає змогу скоротити обсяг обчислень при формуванні матриці;
- вона додатно визначена, тобто при розв'язуванні системи нормальних рівнянь методом головного елемента можна не виконувати процедуру вибору головного елемента;
- її визначник не дорівнює нулю, якщо базисні функції φ_j лінійно незалежні і при цьому система рівнянь має єдиний розв'язок.

Перша і друга властивості не мають принципового значення. А третя є принциповою. Це єдина обов'язкова умова, яка накладається на вибір базисних функцій.

Вибір базисних функцій не є повністю формалізованим процесом. Вигляд цих функцій визначається, перш за все, властивостями досліджуваної системи, зокрема такими як періодичність, експоненціальний або логарифмічний характер, властивостями симетрії, наявність асимптотики та інша апіорна інформація. Наприклад, якщо досліджується процес, який самостійно розвивається (дифузія, теплопередача), то як базисні можна вибирати експоненціальні функції. В разі дослідження коливальних систем бажано користатися періодичними функціями (синуси, косинуси). А загалом на вибір апроксимуючих базисних функцій суттєво впливає апіорна інформація, власний досвід дослідника та його інтуїція. Слід наголосити, що задача апроксимації не має єдиного розв'язку. Наперед не можна стверджувати, що апроксимація, наприклад, степеневою функцією буде кращою ніж експоненціальною. Часто можна застосувати обидві функції, а наближення буде кращим там, де залишки (які ще мають назву “нев'язка”) у вигляді суми їх квадратів будуть меншими. Емпірично встановлено, що апроксимація вважається задовільною, якщо квадратний корінь із суми квадратів відхилень $\sqrt{Q}$ в кожній із вузлових точок таблиці (3.1) приблизно дорівнює похибці визначення експериментальних даних δ :

$$\sqrt{Q} \approx \delta. \quad (3.13)$$

Іноді апроксимацію складною функцією типу (3.2) реалізують за допомогою покрокової процедури. Спочатку функцію (3.2) складають з однієї або двох базисних функцій. Потім розраховують коефіцієнти c_j , визначають величину Q і якщо не виконується умова:

$$\sqrt{q} < \delta, \quad (3.14)$$

то розширюють базис функції (3.2) доповнюючи її ще однією $\varphi_j(x)$ і повторюють розрахунки. Базис розширюють допоки не виконається умова (3.13). Щоб система (3.11) мала єдиний розв'язок, кількість базисних функцій m повинна бути пов'язаною із кількістю точок N таблиці (3.1) співвідношенням:

$$N \geq m+1, \quad (3.15)$$

Розв'язувати систему (3.11) можна будь-яким способом, наприклад методом Гауса або Крамера.

Стан складних систем, зазвичай, залежить від кількох змінних. Наприклад, механічні властивості чавунів залежать від хімічного складу сплаву (кількості Fe, C, Si, Mn, P, S та інших) та, від термо-часової обробки. Такий випадок експерименту можна представити схемою, поданою на рисунку 3.1.

На систему S (рис. 3.1) впливають k -факторів x_j , які змінюють її стан, і це позначається на величині відгуку y . Такий експеримент називають “багатофакторним”. Він є характерним для багатьох промислових та технологічних експериментів.

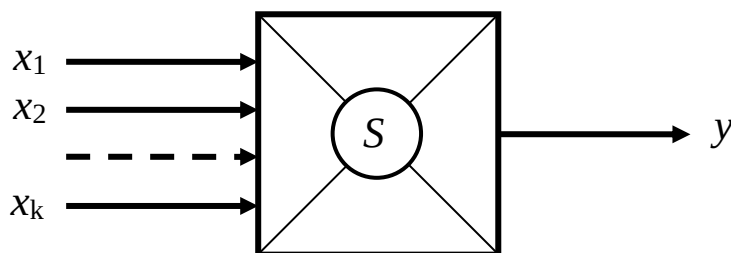


Рис. 3.1. Схематичне зображення багатофакторного експерименту, коли досліджувана система є функцією багатьох змінних $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ $x_1, x_2, \dots, x_k$ – k - факторів, що впливають на систему; y – відгук системи; S – система, яку досліджують

Для
апроксимації
результатів багатофак-
торних експериментів
також можна
застосувати принцип
Лежандра, тобто
реалізувати метод
найменших квадратів.

В цьому випадку потрібно застосовувати загальний алгоритм МНК і як

базові функції вибрати k -факторів (за необхідності – їх ступені x^g і доданки $x_j x_q$). Базисні функції для лінійного варіанту багатфакторної апроксимації мають вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_0(x) = x_0, \\ \varphi_1(x) = x_1, \\ \varphi_2(x) = x_2, \\ \dots\dots\dots \\ \varphi_m(x) = x_k \end{array} \right. \quad (3.16)$$

В цьому випадку загальна апроксимуюча функція набуває вигляду:

$$\phi(x) = c_0 x_0 + c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + \dots + c_k x_k. \quad (3.17)$$

Вигляд розширеної матриці Грама для системи лінійного варіанту багатфакторної апроксимації можна отримати повторивши наведені викладки:

$$\left(\begin{array}{ccccc} \sum_{i=1}^N x_{0i}^2 & \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{0i} & \sum_{i=1}^N x_{2i} x_{0i} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki} x_{0i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{0i} \\ \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{1i} & \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^N x_{2i} x_{1i} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki} x_{1i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{2i} & \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} & \sum_{i=1}^N x_{2i}^2 & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki} x_{2i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{2i} \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ki} & \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{ki} & \sum_{i=1}^N x_{2i} x_{ki} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki}^2 & \sum_{i=1}^N y_i x_{ki} \end{array} \right). \quad (3.18)$$

Розв’язок системи, яка описується розширеною матрицею (3.18), також знаходять за допомогою відповідних методів.

Комп'ютерна програма "MNK", яка пропонується для виконання цього практикуму, реалізує багатовимірний метод найменших квадратів.

При обробці експериментальних даних іноді виникають проблеми, пов'язані, перш за все, з відносно великою експериментальною похибкою деяких результатів. При застосуванні МНК такі точки чітко виділяються в "таблиці залишків" (це виражена у відсотках різниця між експериментальними точками та їх апроксимованими величинами). При обчисленнях їх бажано видаляти, але коли таких точок забагато, слід переробити експеримент.

Також можуть виникати проблеми, пов'язані з кількістю отриманих експериментальних точок в досліді та необхідністю створення складних моделей (дивись умову (3.15)). Така ситуація характерна для багатофакторних експериментів (Рис. 3.1). В цьому випадку при розробці загального плану експерименту бажано застосовувати методологію "активного експерименту" [4, 5]. Його основна ідея полягає в тому, що всі фактори змінюються одночасно, але за певним алгоритмом. Цей алгоритм має назву "матриця плану". Розрізняють кілька типів активних експериментів: повний факторний експеримент першого та другого порядків (ПФЕ L^k , де k - кількість факторів в моделі; L - кількість рівнів варіювання факторів), композиційні ортогональні та рототабельні плани другого порядку, некомпозиційні плани другого порядку. За їх допомогою можна будувати лінійні, квазілінійні та нелінійні математичні моделі.

В активному експерименті застосовують нормовані фактори моделі (змінні експерименту). Для цього послуговуються співвідношенням:

$$X_j = \frac{x_j - \bar{x}_j}{x_{j\max} - \bar{x}_j} \quad (3.19)$$

$$\bar{x}_j = \frac{x_{j\min} + x_{j\max}}{2}, \quad (3.20)$$

де $X_{j \max}$, $X_{j \min}$ – максимальне та мінімальне значення незалежних змінних; j – номер фактору; $\bar{X}$ – середнє значення j -го фактору. Великими літерами позначені нормовані фактори, які змінюється в межах $-1 \leq X_j \leq +1$ і є безрозмірними, а маленьким – фактори у природних розмірностях.

Розглянемо повний факторний експеримент для двох факторів X_1 та X_2 , який позначається як ПФЕ 2^2 . Кількість необхідних дослідів N визначають за формулою:

$$N = L^k. \quad (3.21)$$

За результатами такого експерименту можна побудувати двофакторну квазілінійну модель, яка має вигляд:

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_{12}X_1X_2, \quad (3.22)$$

де Y – відгук, тобто той параметр, який досліджується; b_0 , b_1 , b_2 , b_{12} – коефіцієнти моделі.

Перші три члени виразу (3.22) являють собою лінійну математичну модель, а наявність четвертого члена перетворює її у "квазілінійну". Добуток факторів X_1X_2 називають ефектом взаємодії.

Матриця плану для побудови квазілінійної математичної моделі подана в таблиці 3.1. Як вже зазначалось при проведенні експерименту ПФЕ 2^2 фактори приймають значення ± 1 . Але для зручності в матриці плану їх позначають тільки знаками. Матриця має чотири експериментальні точки. Виділена її частина (стовпчики 3 та 4) показує як повинні змінюватись фактори. Стовпчики 2 та 5 застосовують при обчисленні коефіцієнтів моделі. Стовпчик із номером 6 містить результати вимірювань відгуку, а з номером 7 – апроксимовані значення відгуку, які розраховані за допомогою побудованої моделі. Стовпчик 8 являє собою таблицю залишків, про яку йшлося раніше. Його дані застосовують для попередньої оцінки якості апроксимації та виявлення збійних точок.

Побудована таким чином матриця має такі властивості:

- Ортогональність; це забезпечує незалежність оцінок коефіцієнтів моделі b_j ;
- Симетричність; вона забезпечує незалежну оцінку вільного члена b_0 ;
- Нормування; забезпечує однакову дисперсію оцінки коефіцієнтів (тобто оцінки всіх коефіцієнтів мають однакову величину відносної похибки);
- Рототабельність; забезпечує однакову величину похибки моделі на однаковій відстані від центру плану.

Таблиця 3.1. Матриця плану ПФЕ 2^2

i	X_0	X_1	X_2	$X_1 X_2$	Y_i	$\hat{Y}_i$	$\frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i} 100\%$
1	2	3	4	5	6	7	8
1	+	-	-	+	Y_1	$\hat{Y}_1$	$\frac{Y_1 - \hat{Y}_1}{Y_1} 100\%$
2	+	+	-	-	Y_2	$\hat{Y}_2$	$\frac{Y_2 - \hat{Y}_2}{Y_2} 100\%$
3	+	-	+	-	Y_3	$\hat{Y}_3$	$\frac{Y_3 - \hat{Y}_3}{Y_3} 100\%$
4	+	+	+	+	Y_4	$\hat{Y}_4$	$\frac{Y_4 - \hat{Y}_4}{Y_4} 100\%$

Кожен з коефіцієнтів розраховується незалежно від інших, причому загальна кількість коефіцієнтів не повинна перевищувати числа рівнянь, з яких вони визначаються, а це число збігається з числом рядків матриці планування (вираз (3.21)).

Оцінки величин коефіцієнтів b_j розраховуються за допомогою виразу:

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N X_{ji} Y_i}{N}, \quad (3.23)$$

де N – кількість точок в матриці плану (в даному випадку $N = 4$).

Зверніть увагу на термін "оцінки величин коефіцієнтів". В усіх результатах, отриманих в будь-якому експерименті, завжди присутні похибки вимірювань. Ці похибки впливають на результати розрахунків. Тому розраховані величини коефіцієнтів також мають похибки і мова йде не про точні величини, а про їх оцінки.

Нормування факторів здійснюють, по-перше, для зручності розрахунків коефіцієнтів моделі. Як видно із (3.23), обчислення величин коефіцієнтів із номерами j (b_j) зводиться до визначення алгебраїчної суми відгуків Y_i із знаками j -го стовпчика, поділеної на кількість експериментальних точок плану експерименту. По-друге, при нормованих значеннях змінних, величини коефіцієнтів при факторах показують силу їх впливу на відгук Y . Знак коефіцієнта показує напрямок впливу відповідного фактора на відгук Y .

Після побудови математичної моделі слід перевірити її адекватність. Цю перевірку здійснюють або за допомогою критерія Фішера, або за таблицею залишків. Критерій Фішера визначається як:

$$F = \frac{S_{ад}^2}{S_{в}^2}, \quad (3.24)$$

де $S_{ад}^2$ – дисперсія адекватності, яка характеризує похибку побудованої моделі; $S_{в}^2$ – дисперсія відтворюваності, яка характеризує випадкову похибку експерименту. Слід наголосити, що в правильно побудованому експерименті його похибка має виключно випадковий характер.

Для застосування критерія Фішера необхідно мати інформацію стосовно оцінки величини випадкової похибки, яка оцінюється за

величиною дисперсії відтворюваності S_e^2 . Тому потрібно виконати паралельні вимірювання. Паралельні вимірювання здійснюють або в точках плану ($Y_1 \dots Y_4$), або в додатковій точці в центрі плану, що на практиці застосовують значно частіше (в цьому випадку і кількість експериментів суттєво зменшується). Слід додати, що при дійсно лінійній моделі, в центральній точці плану з координатами $X_1 = 0$ та $X_2 = 0$ виміряна величина відгуку $Y_0 \approx b_0$.

Дисперсія відтворюваності для випадку кількох вимірювань в центрі плану розраховується за формулою:

$$S_B^2 = \frac{\sum_{i=1}^m (Y_{0i} - \bar{Y}_0)^2}{m - 1}, \quad (3.25)$$

де m – кількість вимірювань в центрі плану; Y_{0i} – результати окремих вимірювань в центрі плану; $\bar{Y}_0$ – середнє значення відгуку Y в центрі плану.

Дисперсія адекватності розраховується за виразом:

$$S_{ад}^2 = \frac{q}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - \hat{Y}_i)^2, \quad (3.26)$$

де q – кількість дублів вимірювання відгуку Y в точках плану (в даному випадку $q = 1$); $\sum_{i=1}^N (Y_i - \hat{Y}_i)^2$ – сума квадратів різниць між експериментальними результатами (колонка 6 в таблиці 1) та апроксимованими значеннями $\hat{Y}$ (колонка 7 в таблиці 3.1), які розраховані з допомогою побудованої математичної моделі (3.22).

Розраховане значення критерія Фішера F слід перевірити на значимість порівнюючи його з табличним значенням $F_{табл}$. Якщо $F < F_{табл}$, то побудована математична модель з прийнятим рівнем статистичної значимості α адекватна експериментальним даним і її можна застосовувати

для подальших розрахунків. Рівень статистичної значимості α зв'язаний з довірчою ймовірністю $P: \alpha = P - 1$. Зазвичай вибирають $\alpha = 0,05$ ($P = 0,95$). $F_{табл}$ для заданого α вибирається з відповідної таблиці (додаток 3) для ступенів свободи адекватності $f_{ад} = N$ та відтворюваності $f_{\epsilon} = m - 1$.

Якщо в ході експерименту вимірювання не дублювалися, то визначити дисперсію відтворюваності S_{ϵ}^2 неможливо. Тоді адекватність моделі можна визначити за таблицею залишків (колонка 9 таблиці 3.1), які розраховуються як оцінка відносної похибки між експериментальними значеннями відгуку Y_i та значенням $\hat{Y}_i$, які розраховані з допомогою побудованої математичної моделі. Якщо модель є адекватною, то величина залишків не може значно перевищувати відносну похибку експерименту.

Якщо лінійна або квазілінійна модель визначена як неадекватна, слід побудувати нелінійну модель. Для двох факторів вона має вигляд:

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_{12}X_1X_2 + b_{11}X_1^2 + b_{22}X_2^2. \quad (3.27)$$

Для цього застосовують композиційні плани експерименту другого порядку. Такі плани базуються на розглянутому раніше плані ПФЕ першого порядку. Точки плану ПФЕ доповнюють додатковими, так званими “зірковими” точками, які перебувають на відстані “зіркового” плеча від центру плану. Обов’язково також додається точка в центрі плану.

Наявність додаткових точок позбавляють матрицю плану тих властивостей, притаманних матрицям ПФЕ. Тому додаткові точки розташовують таким чином, щоб матриця плану мала властивість ортогональності або рототабельності. Для випадку двох факторів розташування експериментальних точок в факторному просторі для ортогонального композиційного плану (ОКП) другого порядку показано на рисунку 3.2. Композиційний ортогональний план включає точки повного факторного експерименту №1 - №4, “зіркові” точки №5 - №8 та центральну

точку №9. Величина “зіркових” плечей залежить від кількості факторів (для двох факторів $\pm\alpha_{1,2} = 1$).

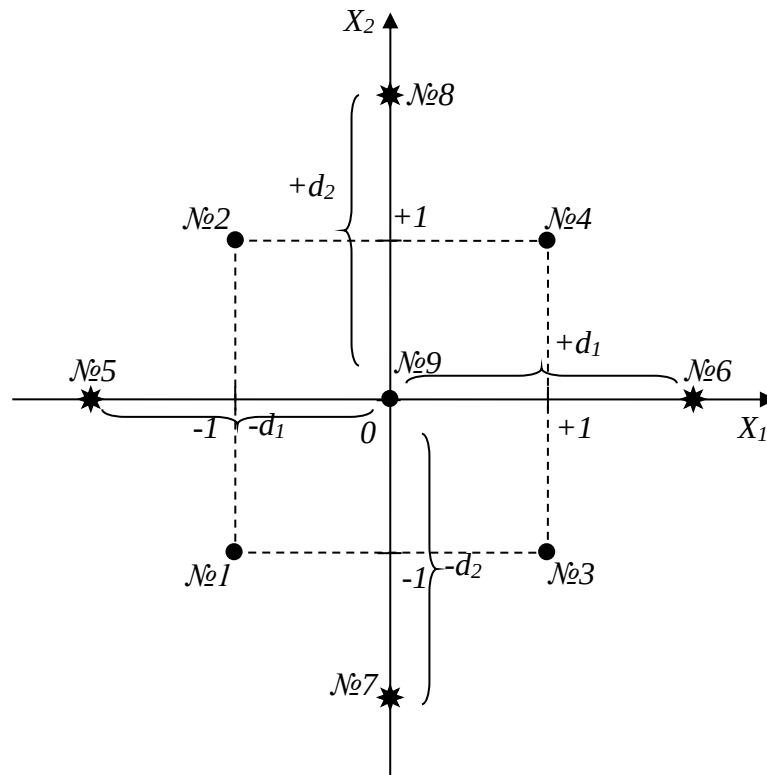


Рис. 3.2. Факторний простір та точки композиційного ортогонального плану: №1 - №4 – точки повного факторного експерименту; №5 - №8 - “зіркові” точки; №9 – центральна точка; $\pm d_{1,2}$ – числові значення “зіркових” плеч.

Як зазначалось, ортогональність матриці плану дає змогу при побудові математичної моделі отримати незалежні оцінки коефіцієнтів при її членах. Це достатньо зручно, адже в цьому випадку можна оцінити значимість коефіцієнтів моделі і не значимі вилучити із рівняння без повторних розрахунків.

Щоб отримати ортогональний план другого порядку слід забезпечити виконання двох умов:

$$\sum_{u=1}^N X_{0u} X_{iu}^2 = 0 \text{ та } \sum_{u=1}^N X_{iu}^2 X_{ju}^2 = 0. \quad (3.28)$$

Першу умову із (3.28) можна виконати за допомогою перетворення квадратичних змінних:

$$X'_i = X_i^2 - \frac{\sum_{u=1}^N X_{iu}^2}{N} = X_i^2 - \bar{X}_i^2. \quad (3.29)$$

Величина $\bar{X}_i^2$ залежить від кількості факторів k та величини плеча d :

$$\bar{X}_i^2 = \frac{2^k + 2d^2}{2^k + 2k + 1}. \quad (3.30)$$

Якщо позначити $\bar{X}_i^2 = \phi$, то:

$$\phi = \frac{2^k + 2d^2}{N}. \quad (3.31)$$

Знаменник рівняння (3.29) дорівнює N , яке визначається як:

$$N = 2^k + 2k + 1, \quad (3.32)$$

де 2^k – кількість точок ядра плану (для випадку ПФЕ 2^k); $2k$ – кількість “зіркових” точок; 1 – одна точка в центрі плану.

З умови ортогональності вектор-стовпчиків квадратичних членів моделі (3.27) можна записати ще одне рівняння:

$$2^k(1 - \phi) - 4\phi(d^2 - \phi) + 2(k - \phi)\phi^2 + \phi^2 = 0. \quad (3.33)$$

Спільний розв'язок рівнянь (3.30) та (3.33) дає загальні формули для визначення величин ϕ та d при побудові ортогональних планів другого порядку:

$$\phi = \sqrt{\frac{2^k}{N}}, \quad (3.34)$$

$$d = \sqrt{\frac{N\phi - 2^k}{2}}. \quad (3.35)$$

Якщо ядром композиційного плану є план ПФЕ 2^2 , то кількість точок плану становить $N = 2^2 + 2 \cdot 2 + 1 = 9$, а за (3.34) та (3.35) отримуємо $\phi = 2/3 \approx 0,6667$; $d = 1,0000$.

Матриця композиційного ортогонального плану другого порядку для двох факторів наведена в таблиці 3.2.

Таблиця 3.2. Матриця плану ОКП другого порядку для двох факторів

Дослід	x_0	x_1	x_2	$x_1^2 - \frac{2}{3}$	$x_2^2 - \frac{2}{3}$	$x_1 x_2$	Y
ПФЕ 2^2	+1	-1	-1	+1/3	+1/3	+1	Y_1
	+1	+1	-1	+1/3	+1/3	-1	Y_2
	+1	-1	+1	+1/3	+1/3	-1	Y_3
	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	+1	Y_4
“Зіркові” точки	+1	-1	0	1/3	-2/3	0	Y_5
	+1	+1	0	1/3	-2/3	0	Y_6
	+1	0	-1	-2/3	1/3	0	Y_7
	+1	0	+1	-2/3	1/3	0	Y_8
Центр	+1	0	0	-2/3	-2/3	0	Y_9

Забезпечивши ортогональність композиційного плану, можна визначити коефіцієнти моделі незалежно один від одного за формулою:

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N X_{iu} Y_u}{\sum_{u=1}^N X_{iu}^2}, \quad (3.36)$$

де i – номер стовпчика в матриці плану; x_{ui} – елементи i -го стовпчика.

Враховуючи перетворення квадратичних членів моделі, здійснені для ортогоналізації матриці плану, потрібно скорегувати вільний член рівняння (3.27):

$$b_0 = b'_0 - \sum_{1 < i \leq 2} \phi b_{ii} . \quad (3.37)$$

Адекватність моделі в даному випадку можна визначати за критерієм Фішера. Проте на практиці частіше аналізують таблицю залишків.

Проте набагато зручніше та надійніше розрахувати коефіцієнти моделі за допомогою методу найменших квадратів і його програмної реалізації (наприклад, програми "MNK").

Порядок виконання роботи

За даними багатофакторного експерименту побудувати математичну модель із застосуванням покрокового регресійного аналізу, який базується на багатовимірному варіанті методу найменших квадратів. Визначити адекватність моделі. За тими ж даним побудувати матрицю плану ПФЕ 2^2 або ОКП і розрахувати коефіцієнти. Порівняти отримані моделі. Дані для розрахунків наведені в додатку Б. Для проведення розрахунків потрібно:

1. Запустити програму “MNK” на виконання.
2. Ввести дані в таблицю, натиснувши кнопку “Таблиця” (Рис. 3.3). Дані слід вводити у відповідні стовпчики послідовно по порядку. Розділовий знак цілої та дробової частин числа – кома. Після закінчення введення даних їх потрібно зберегти у вигляді файлу, натиснувши “Файл” та “Сохранить” і набравши назву файлу “... .mpk”. За необхідності працювати із існуючим

файлом, то натискаємо “Файл” та “Открыть” і вказується назва потрібного файлу.

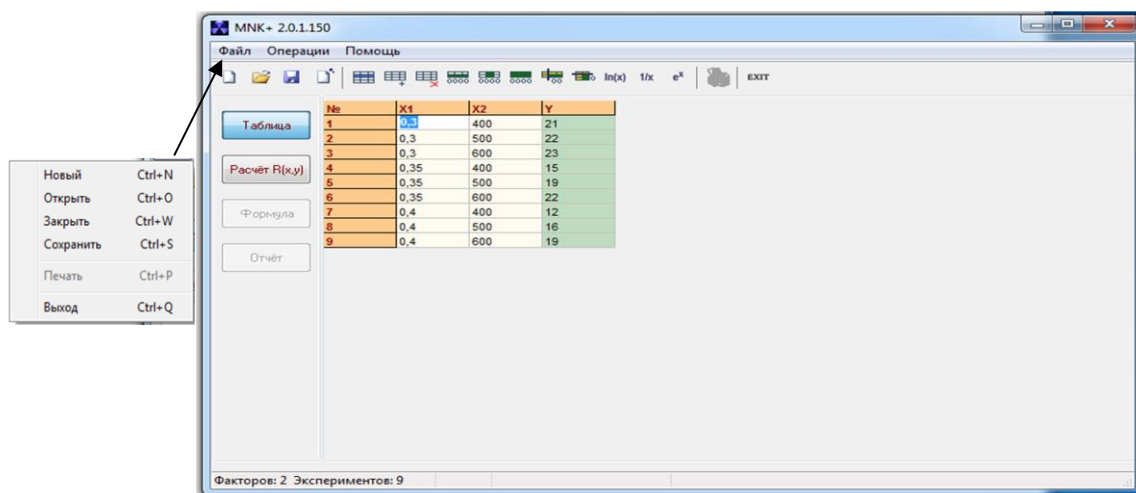
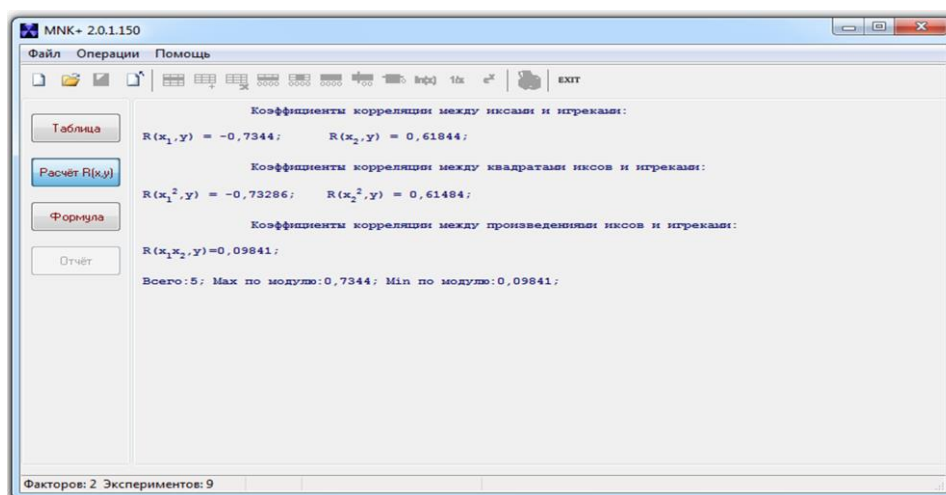


Рис. 3.3. Інтерфейс програми “MNK”, що відповідає початку роботи

3. Перевести програму у режим обчислень коефіцієнтів кореляції, натиснувши клавішу “Расчет R(x,y)” (Рис. 3.4). Розрахувати значення коефіцієнтів кореляції факторів експерименту (x_i) та ефектів взаємодії ($x_i \cdot x_j$) з відгуком (y) і записати їх у порядку спадання.



Рису. 3.4. Інтерфейс програми “MNK”, що відповідає розрахунку коефіцієнтів кореляції

4. Побудувати математичну модель (Рис. 3.5), перевівши програму у режим обчислень за допомогою клавіші “Расчет”. У вікно “Порог [0..1]”

ввести приблизно середнє значення коефіцієнтів кореляції. У цьому вікні можна залишити нуль. Введена величина впливає на запропонований програмою вигляд математичної моделі. Потім потрібно натиснути клавішу “Рассчитать”. У відповідному вікні з’явиться формула математичної моделі, яку за необхідності, можна коригувати (підказка для коригування розташована над вікном). За необхідності, змінити вигляд математичної моделі та очистити вікно із формулою можна натиснувши клавішу “Очистить”.

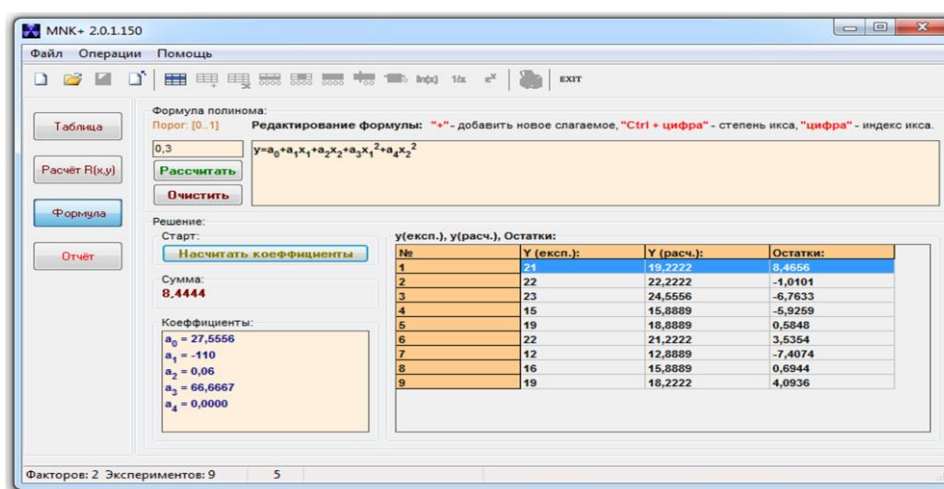


Рис. 3.5. Інтерфейс програми “MNK”, що відповідає розрахунку коефіцієнтів моделі

Після натискання кнопки “Рассчитать коэффициенты” відбувається розрахунок коефіцієнтів моделі, значення яких з’являється у вікні знизу. Вікно праворуч дає інформацію стосовно адекватності моделі. В першій колонці зазначеного вікна показано номер експериментальної точки з таблиці даних. В другій – введені в таблицю значення відгуку ($Y_{\text{експ.}}$), а в третій – апроксимовані за допомогою побудованої математичної моделі значення відгуку ($Y_{\text{роз.}}$). В останній колонці наведена таблиця залишків які виражені у відсотках $\left(\left(\frac{Y_{\text{експ.}} - Y_{\text{розр.}}}{Y_{\text{експ.}}} \right) \cdot 100\% \right)$. Якщо похибка апроксимації приблизно дорівнює або менша від похибки експерименту, то побудована математична модель вважається адекватною і розрахунки закінчуються. В

разі неадекватності моделі потрібно повернутись на етап формування формули і повторити розрахунки. При цьому зручно застосовувати алгоритм покрокової регресії. Він є своєрідним варіантом методу послідовних наближень. Спочатку будується достатньо проста математична модель із застосуванням факторів та ефектів взаємодії (додатки факторів) з найбільшими коефіцієнтами кореляції, а потім – поступово (покроково) додаються інші. Успішність кроку оцінюється за величиною, яка з'являється у вікні “Сумма”. Якщо при введенні в формулу моделі нового члена “Сумма” суттєво зменшується, то крок вважається вдалим. Якщо ні, то даний фактор або ефект взаємодії краще не враховувати.

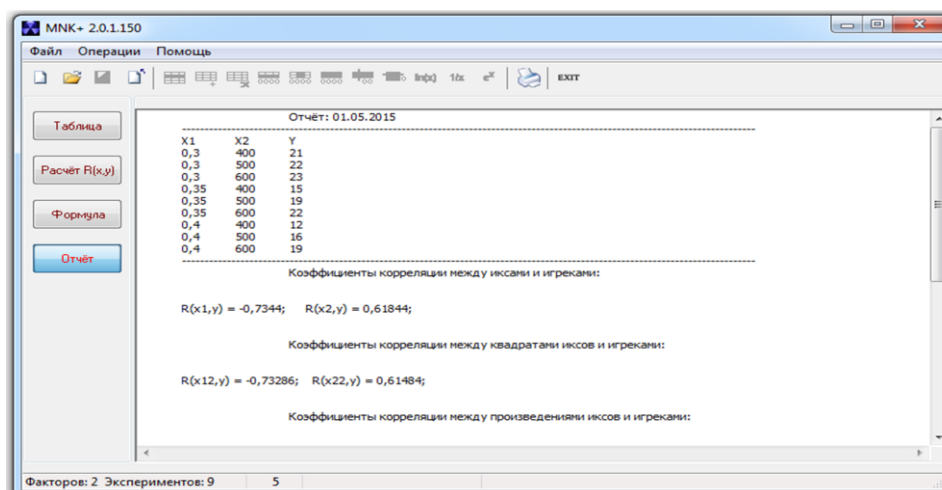


Рис. 3.6. Інтерфейс програми “MNK”, що відповідає виводу результатів розрахунків на друк

5. Вивести результати розрахунків на друк за допомогою кнопки “Отчет” (Рис. 3.6). Натиснувши на клавішу з наступного меню, отримати результати обчислень на папері.

6. Закінчити обчислення і вийти з програми, вибравши команду “Enter” на інтерфейсі виводу результатів (Рис. 3.3) або “Выход” в загальному меню (рис. 3.3).

7. Здійснити нормування факторів моделі за допомогою виразів (3.19) та (3.20).

8. Побудувати матрицю плану ПФЕ 2^2 та обчислити коефіцієнти математичної моделі (3.22) за допомогою виразу (3.23). Перевірити побудовану модель на адекватність (за критерієм Фішера або за таблицею залишків). Якщо модель неадекватна, то слід побудувати матрицю плану ОКП та обчислити коефіцієнти математичної моделі (3.27) за допомогою виразів (3.36) та (3.37) або із застосуванням програми, яка реалізує метод найменших квадратів. Перевірити побудовану модель на адекватність.

9. Порівняти результати моделювання за обома методами.

10. Сформулювати висновки по роботі.

11. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. В чому полягає принцип Лежандра (принцип МНК)?
2. Що є ознакою екстремуму функції кількох змінних?
3. Наведіть визначення градієнта.
4. Які властивості притаманні інформаційній матриці (матриці Грама)?
5. Яким співвідношенням і чому кількість базисних функцій m пов'язана з кількістю експериментальних точок N ?
6. Який експеримент називається багатофакторним?
7. Який принцип закладено в основу покрокової регресії?
8. Яку математичну модель можна побудувати із застосуванням ПФЕ 2^2 ?
9. Який вигляд мають змінні в факторних експериментах?
10. Яким чином можна довести адекватність математичної моделі, побудованої за експериментальними даними?
11. Які параметри оцінюють за дисперсіями відтворюваності та адекватності?
12. Для побудови яких моделей застосовують експеримент з ОКП?
13. Для чого експеримент з ОКП роблять композиційним або ортогональним?

Комп'ютерний практикум № 4

СИМПЛЕКС-ЗАГРАТОВАНИЙ ПЛАНОВАНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ПОБУДОВИ МОДЕЛІ «СКЛАД-ВЛАСТИВОСТІ СПЛАВУ»

Мета роботи: опанувати методику планування експерименту для побудови математичної моделі “склад-властивості” та засвоїти принципи побудови математичних моделей високих порядків на прикладі сплаву системи Al-Mg-Zn.

Теоретичні відомості

Вирішення завдання вибору оптимального хімічного складу багатокомпонентного сплаву або багатокомпонентної суміші відрізняється від вибору оптимальних умов технологічного процесу тим, що змінні (фактори) в першому випадку пов'язані співвідношенням:

$$\sum_{i=1}^K X_i = 1 \text{ або } (100\%). \quad (4.1)$$

Дійсно, перший рядок матриці плану активного факторного експерименту має рядок, в якому всі фактори перебувають на нижньому рівні, тобто приймають значення -1. А в останньому рядку всі фактори приймають значення +1. Проте сумарний вміст всіх компонентів сплаву не може бути ні менший та не більший за 1 (тобто 100%).

Зазначені міркування стосуються як сплавів, так і сумішей. Для зручності надалі будемо розглядати сплави.

Через те, що сума часток всіх компонентів, які утворюють сплав, дорівнює одиниці, факторний простір можна представити правильним симплексом. Симплексом називається $(N + 1)$ рівновіддалена вершина в N -

вимірному просторі. Для трьох компонентів симплекс є рівностороннім (правильним) трикутником.

При симплекс-загратованому плануванні експерименту властивості сплаву досліджують в наперед заданих точках симплекса. Ці точки утворюють так звану симплексну ґратку. Кожній ґратці відповідає цілком певна поліноміальна математична модель (поліном), коефіцієнти якої визначають за спеціальними формулам або із застосуванням методу найменших квадратів (МНК). Зазвичай на практиці при створенні математичних моделей типу “склад-властивості” застосовують поліноми до четвертого ступеня включно.

В основу симплексно-загратованого планування покладена ідея покрокового пошуку. Підвищення степені полінома після кожного кроку здійснюють після перевірки адекватності моделі (більш детально розглядається далі). Якщо виявляється, наприклад, що квадратична модель неадекватна, то здійснюється перехід до моделі більш високого ступеня. Чим вищий ступінь поліному, тим більша кількість дослідів необхідна для його побудови.

Необхідну кількість дослідів N в експерименті можна розрахувати за формулою:

$$N = \frac{(m + q - 1)!}{m! (q - 1)!}, \quad (4.2)$$

де m - ступінь моделі; q - кількість компонентів сплаву.

Для визначення необхідної кількості дослідів також можна користуватись таблицею 4.1.

Розташування дослідів у факторному просторі можна легко простежити на прикладі трикомпонентного сплаву. Відомо, що склад трикомпонентного сплаву можна подати на трикутній діаграмі. Кожній точці такої діаграми відповідає один, цілком визначений склад, а кожному складу відповідає одна точка на діаграмі. Кожній із вершин трикутної

діаграми відповідають чисті компоненти (їх вміст становить 100 %). На протилежних до вершин сторонах вміст відповідного компонента становить 0.

Таблиця 4.1. Мінімальна кількість дослідів для побудови математичних моделей різних ступенів

Кількість компонентів сплаву	Порядок (тип) математичної моделі			
	Квадратична	Спеціальна кубічна	Кубічна	Четвертого ступеня
q				
3	6	7	10	15
4	10	14	20	35
5	15	25	35	70
6	21	41	56	126
7	28	63	84	210
8	36	92	120	330
9	55	175	220	715

Для побудови лінійної моделі необхідно виконати три досліді (Рис. 4.1 а). Для перевірки адекватності побудованої моделі необхідний четвертий дослід в центрі трикутника. Цифри біля точок відповідають індексам відгуків. Кількість цифр в індексі означає частки компонентів в сплаві. Число повторів кожної цифри показує кількість часток відповідного компонента. При такій індексації план експерименту для побудови лінійної моделі трикомпонентного сплаву можна задати таблицею 4.2.

Для переходу від лінійної моделі до квадратичної, план слід доповнити трьома дослідіми з бінарними сплавами з однаковими вмістами кожного з компонентів. Тому для побудови математичної моделі другого ступеня необхідно виконати шість дослідів (рис. 4.1 б;). план експерименту наведений в таблиці 4.3). Дослід в центрі плану зі сплавом, який містить по 1/3 частки кожного з компонентів, потрібний для перевірки адекватності

моделі. Порівняно з таблицею 4.2, до таблиці 4.3 додані дослід з бінарними сплавами, частки компонентів яких становлять по $\frac{1}{2}$ (по 50%).

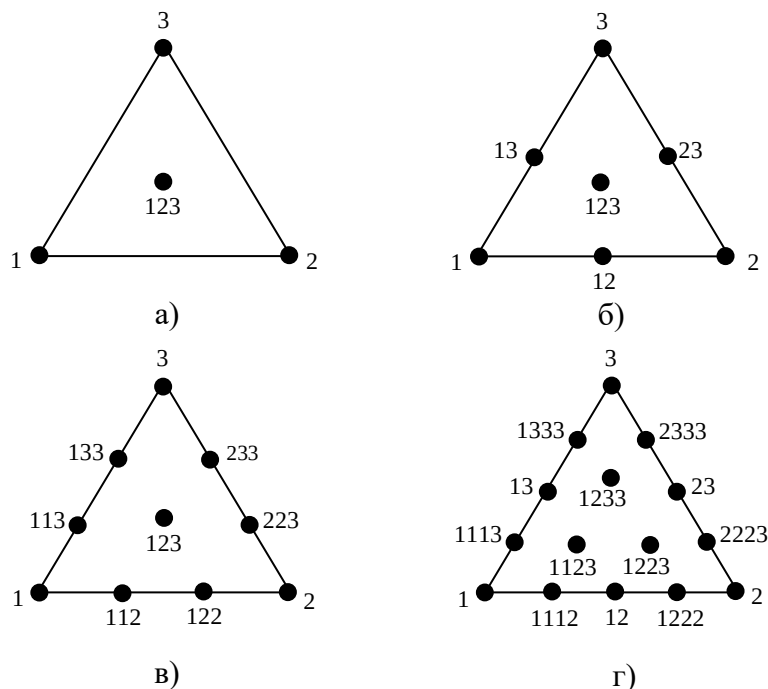


Рис. 4.1. Розташування дослідів в факторному просторі для різних математичних моделей трикомпонентного сплаву: а) – лінійна модель; б) – квадратна та спеціальна кубічна модель; в) – кубічна модель; г) – модель четвертого ступеня

Таблиця 4.2. План експерименту для побудови лінійної моделі трикомпонентного сплаву

Дослід	Склад компонентів			Відгук
	x_1	x_2	x_3	
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	1/3	1/3	1/3	Y_{123}

На рисунку 4.1в наведений розподіл точок симплексної ґратки для побудови моделі третього ступеня. Всього план включає десять дослідів: три з чистими компонентами, один в центрі – зі складом по $\frac{1}{3}$ кожного з

компонентів та шість дослідів з бінарними сплавами, які повинні містити по $1/3$ одного з компонентів та по $2/3$ іншого.

Для побудови математичної моделі четвертого ступеня трикомпонентного сплаву потрібні дослід в 15 точках: по 3 точки з чистими компонентами та бінарними складами; 6 точок для сплавів, які містять по одній частині одного з компонентів і по три частинами іншого; та 3 точки, які розташовані навколо центру факторного простору (сплави в цих точках містять по одній частині двох компонентів і ще дві частини третього (Рис. 4.1 г).

Таблиця 4.3. План експерименту для побудови моделі другого ступеня трикомпонентного сплаву

Дослід	Склад компонентів			Відгук
	X_1	X_2	X_3	
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	$1/2$	$1/2$	0	Y_{12}
5	$1/2$	0	$1/2$	Y_{13}
6	0	$1/2$	$1/2$	Y_{23}
7	$1/3$	$1/3$	$1/3$	Y_{123}

Вибір ступеня моделі здійснюється у відповідності з принципом покрокового пошуку. На кожному з кроків перевіряється адекватність побудованої моделі. Якщо виявляється, наприклад, що квадратична модель неадекватна, то слід перейти до моделі більш високого порядку.

В симплекс-загратованому плануванні кожному плану відповідає цілком певна поліноміальна модель. Загальний вигляд моделі та формули для розрахунків коефіцієнтів для сплаву з q компонентами наведені нижче.

Лінійна модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i X_i , \quad (4.3)$$

де $b_i = Y_i$.

Квадратична модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i X_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} X_i X_j , \quad (4.4)$$

де $b_i = Y_i$; $b_{ij} = 4Y_{ij} - 2Y_i - 2Y_j$.

Спеціальна кубічна модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i X_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} X_i X_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijk} X_i X_j X_k , \quad (4.5)$$

де

$$b_i = Y_i;$$

$$b_{ij} = 4Y_{ij} - 2Y_i - 2Y_j; b_{ijk} = 27Y_{ijk} - 12(Y_{ij} + Y_{ik} + Y_{jk}) + 3(Y_i + Y_j + Y_k).$$

Кубічна модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i X_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} X_i X_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \gamma_{ij} X_i X_j (X_i - X_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijk} X_i X_j X_k \quad (4.6)$$

де

$$b_i = Y_i; b_{ij} = 9/4 (Y_{iij} + Y_{ijj} - Y_i - Y_j); \gamma_{ij} = 9/4 (3Y_{iij} + 3Y_{ijj} - Y_i - Y_j);$$

$$b_{ijk} = 27Y_{ijk} - 27/4 (Y_{iij} + Y_{ijj} + Y_{iik} + Y_{ikk} + Y_{jjk} + Y_{jkk}) + 9/2 (Y_i + Y_j + Y_k).$$

Модель четвертого ступеня:

$$\begin{aligned}
 Y = & \sum_{1 \leq i \leq q} b_i X_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} X_i X_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \gamma_{ij} X_i X_j (X_i - X_j) + \\
 & + \sum_{1 \leq i < j < k} \delta_{ij} X_i X_j (X_i - X_j)^2 + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{iijk} X_i^2 X_j X_k + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijjk} X_i X_j^2 X_k + \\
 & + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijkk} X_i X_j X_k^2 + \sum_{1 \leq i < j < k < l \leq q} b_{ijkl} X_i X_j X_k X_l \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 b_i &= Y_i; \quad b_{ij} = 4Y_{ij} - 2Y_i - 2Y_j; \quad \gamma_{ij} = \frac{8}{3}(-Y_i + 2Y_{iij} - 2Y_{ijj} + Y_j); \\
 \delta_{ij} &= \frac{8}{3}(-Y_i + 4Y_{iij} - 6Y_{ij} + 4Y_{ijj} + Y_j); \\
 b_{iijk} &= 32(3Y_{iijk} - Y_{ijjk} - Y_{ijkk}) + \frac{8}{3}(6Y_i - Y_j - Y_k) - 16(Y_{ij} + Y_{ik}) - \\
 & - \frac{16}{3}(5Y_{iij} + 5Y_{iik} - 3Y_{ijj} - 3Y_{ikk} - Y_{jjk} - Y_{jkk}); \\
 b_{ijjk} &= 32(3Y_{ijjk} - Y_{iijk} - Y_{ijkk}) + \frac{8}{3}(6Y_j - Y_i - Y_k) - 16(Y_{ij} + Y_{jk}) - \\
 & - \frac{16}{3}(5Y_{ijj} + 5Y_{jjk} - 3Y_{iij} - 3Y_{jkk} - Y_{iik} - Y_{ikk}); \\
 b_{ijkk} &= 32(3Y_{ijkk} - Y_{ijjk} - Y_{iikk}) + \frac{8}{3}(6Y_k - Y_i - Y_j) - 16(Y_{ik} + Y_{jk}) - \\
 & - \frac{16}{3}(5Y_{ikk} + 5Y_{jkk} - 3Y_{iik} - 3Y_{jjk} - Y_{iij} - Y_{ijj}); \\
 b_{ijkl} &= 256Y_{ijkl} - 32(Y_{iijk} + Y_{iijl} + Y_{iikl} + Y_{ijjk} + Y_{ijjl} + Y_{jjkl} + Y_{ijkk} + \\
 & + Y_{Y_{ikkl}} + Y_{ijll} + Y_{jkl} + Y_{jkk}) + \frac{32}{3}(Y_{iil} + Y_{iik} + Y_{iul} + Y_{ijj} + Y_{jjk} + \\
 & + Y_{jjl} + Y_{ikk} + Y_{jkk} + Y_{kkk} + Y_{ill} + Y_{jll} + Y_{kll});
 \end{aligned}$$

За допомогою симплекс-загартованого планування одержуємо моделі, число коефіцієнтів регресії в яких точно відповідає числу дослідів в плані. При цьому не залишається жодного ступеня свободи для перевірки адекватності моделі. Ця обставина є одним з недоліків планів Г. Шеффе.

Тому адекватність моделі перевіряють за контрольними дослідом в тій частині факторного простору, яка цікавить дослідника. На практиці зазвичай це є центральна точка факторного простору.

В разі адекватності експериментальним даним, одержані поліноміальні математичні моделі аналізують залежно від поставленого завдання. Можна, наприклад, дослідити моделі на екстремум і знайти максимальне чи мінімальне значення відгуку. Для наочності результати моделювання трьох факторних систем зручно і подавати у вигляді контурних кривих на трикутних діаграмах.

На практиці залежність властивостей від складу сплаву зазвичай описують відрізком степеневого ряду (поліномом тієї чи іншої степені). Задача дослідника зводиться до уточнення ступеня поліному, вибору необхідної кількості експериментальних точок, проведення експерименту та визначення показників властивостей в цих точках і розрахунку коефіцієнтів обраної моделі за експериментальними значеннями. Через те, що в багатокомпонентних системах поверхня відгуку має, як правило, досить складний характер, її слід описувати поліномами порівняно високих степенів (третьої і вище).

Для сплавів системи Al-Mg-Zn відомо, що поверхня відгуку, яка є графічною інтерпретацією залежності між властивостями сплаву та вмістом легуючих елементів, задовільно описується поліномами четвертої степені.

Загальний вигляд моделі четвертої степені для трикомпонентної системи ($q = 3$), який формується із виразу (4.7), має такий вигляд:

$$\begin{aligned} Y = & b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + \\ & + \gamma_{12}X_1X_2(X_1 - X_2) + \gamma_{13}X_1X_3(X_1 - X_3) + \gamma_{23}X_2X_3(X_2 - X_3) + \\ & + \delta_{12}X_1X_2(X_1 - X_2)^2 + \delta_{13}X_1X_3(X_1 - X_3)^2 + \delta_{23}X_2X_3(X_2 - X_3)^2 + \\ & + b_{1123}X_1^2X_2X_3 + b_{1223}X_1X_2^2X_3 + b_{1233}X_1X_2X_3^2, \end{aligned} \quad (4.8)$$

де Y - механічні властивості сплаву Al-Mg-Zn; X_1, X_2, X_3 - відповідно частки Mg, Zn, та Al; b, γ, δ - коефіцієнти математичної моделі, які розраховують за формулами:

$$\gamma_{12} = \frac{8}{3}(-Y_1 + 2Y_{1112} - 2Y_{1222} + Y_2);$$

$$\gamma_{13} = \frac{8}{3}(-Y_1 + 2Y_{1113} - 2Y_{1333} + Y_3);$$

$$\gamma_{23} = \frac{8}{3}(-Y_2 + 2Y_{2223} - 2Y_{2333} + Y_3);$$

$$\delta_{12} = \frac{8}{3}(-Y_1 + 4Y_{1112} - 6Y_{12} + 4Y_{1222} + Y_2);$$

$$\delta_{13} = \frac{8}{3}(-Y_1 + 4Y_{1113} - 6Y_{13} + 4Y_{1333} + Y_3);$$

$$\delta_{23} = \frac{8}{3}(-Y_2 + 4Y_{2223} - 6Y_{23} + 4Y_{2333} + Y_3);$$

$$b_{1123} = 32(3Y_{1123} - Y_{1223} - Y_{1233}) + \frac{8}{3}(6Y_1 - Y_2 - Y_3) - 16(Y_{12} + Y_{13}) - \frac{16}{3}(5Y_{1112} + 5Y_{1113} - 3Y_{1222} - 3Y_{1333} - Y_{2223} - Y_{2333});$$

$$b_{1223} = 32(3Y_{1223} - Y_{1123} - Y_{1233}) + \frac{8}{3}(6Y_2 - Y_1 - Y_3) - 16(Y_{12} + Y_{23}) - \frac{16}{3}(5Y_{1222} + 5Y_{2223} - 3Y_{2223} - 3Y_{2333} - Y_{1113} - Y_{1333});$$

$$b_{1233} = 32(3Y_{1233} - Y_{1123} - Y_{1233}) + \frac{8}{3}(6Y_3 - Y_1 - Y_2) - 16(Y_{13} + Y_{23}) - \frac{16}{3}(5Y_{1333} + 5Y_{2223} - 3Y_{1113} - 3Y_{2223} - Y_{1112} - Y_{1222}).$$

де $b_i = Y_i$; $b_{ij} = 4Y_{ij} - 2Y_i - 2Y_j$, $i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3$;

Для побудови математичної моделі четвертої степені потрібно п'ятнадцять дослідів (це можна розрахувати за виразом (4.2) для $q = 3$ та $m = 4$). Для перевірки адекватності моделі бажано провести шістнадцятий дослід в центрі плану.

Поверхні відгуку, як функції залежності властивостей від вмісту легуючих елементів, графічно зображають у вигляді ліній однакового рівня. Такі графіки зручні і наочні лише для трьох факторів. При більшій кількості факторів можна будувати розрізи різного типу, проте це не дуже зручно, тому краще застосовувати методи теорії оптимізації.

Порядок виконання роботи

Відповідно до заданого викладачем набору експериментальних даних для сплаву системи Al-Mg-Zn, побудувати матрицю симплекс-загратованого плану. Побудувати план експерименту “склад – властивість”. Застосовуючи формулу (4.8) скласти комп'ютерну програму (мова програмування – довільна) та за допомогою цієї програми побудувати математичну модель четвертого порядку. За результатами моделювання побудувати графічну інтерпретацію моделі у вигляді ліній однакового рівня. Дані для розрахунків наведені в додатку В. Для проведення розрахунків потрібно:

1. Побудувати матрицю симплекс-загратованого плану.
2. Відповідно до рисунку 4.1 г та результатів визначення вказаної викладачем властивості сплаву системи Al-Mg-Zn, заповнити матрицю симплекс-загратованого плану з факторами (компонентами сплаву), які виражені у частках.
3. Розробити комп'ютерну програму, яка реалізує розрахунки коефіцієнтів математичної моделі четвертого порядку за формулою (4.8).
4. За допомогою розробленої комп'ютерної програми розрахувати коефіцієнти математичної моделі четвертого порядку.
5. Перевірити адекватність моделі за критерієм Фішера.
6. Побудувати графік ліній однакового рівня за допомогою комп'ютерної програми “EqLine”, яка наведена в додатку. В програмі “EqLine” слід задати коефіцієнти математичної моделі та рівні функції відгуку.

6. Сформулювати висновки по роботі.
7. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Чому в експериментах типу “склад – властивості” неможливо застосовувати активні факторні плани?
2. Як визначається симплекс?
3. Які типи математичних моделей застосовують у симплекс-загратованих планах?
4. Для чого дублюють вимірювання відгуку в центрі симплекс-загратованих планів?
5. Що розуміють під терміном “покроковий пошук”?
6. Які особливості має перевірка адекватності моделі при застосуванні симплекс-загратованого планування?
7. Що мають на увазі, застосовуючи термін «лінії однакового рівня»?

БАГАТОКРИТЕРІАЛЬНА ОПТИМІЗАЦІЯ МЕТОДОМ ПОСЛІДОВНИХ ПОСТУПОК

Мета роботи: опанувати методики багатокритеріальної оптимізації та загального пошуку при визначенні технологічних параметрів отримання матеріалів із заданими властивостями з реалізацією у вигляді комп'ютерної програми.

Теоретичні відомості

В теорії оптимізації більшість теоретичних задач розглядають для випадку однієї цільової функції (математичної моделі). Саме ця дуже важлива загальна умова забезпечила можливість створення ефективних методів розв'язання оптимізаційних задач. Однак, природно, виникає питання: наскільки добре такі оптимізаційні моделі описують реальну дійсність? Відповідь на нього неоднозначна. Дійсно, ці моделі можуть досить добре описувати порівняно прості ситуації. Проте часто доводиться мати справу з ситуацією, коли переслідується відразу кілька цілей. Наприклад, якість матеріалів характеризується набором властивостей, які часто є взаємовиключними. Для металевих сплавів однією із найважливіших характеристик є механічні властивості, зокрема, межа міцності, пластичність, твердість. Причому збільшення міцності супроводжується зменшенням пластичності. Очевидно, що при наявності декількох цільових функцій (наприклад, міцність, пластичність та твердість) одночасно досягти їх максимальних значень неможливо. Ймовірність того, що екстремуми властивостей збігаються безкінечно мала. Тому математичного розв'язку подібної задачі не існує, хоча практичні вимоги потребують прийняття подібних оптимальних рішень.

Для визначеності надалі як характеристику міцності будемо розглядати межу міцності при розтягуванні (σ_{θ}), а як характеристику пластичності – відносне видовження (δ).

Для прикладу розглянемо таку задачу. За результатами експериментів побудовані математичні моделі міцності і пластичності, а задача оптимізації сформульована таким чином:

$$\sigma_{\theta} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (5.1)$$

$$\delta = f_2(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (5.2)$$

$$x_1 \in [x_{1min}, x_{1max}], \quad (5.3)$$

$$x_2 \in [x_{2min}, x_{2max}], \quad (5.4)$$

.....,

$$x_k \in [x_{kmin}, x_{kmax}], \quad (5.5)$$

де $x_1, x_2, \dots, x_k$ - фактори, які впливають на показники σ_{θ} та δ і є параметрами математичних моделей; x_{jmin} та x_{jmax} – мінімальні та максимальні значення, які можуть приймати фактори.

Вирази (5.1) та (5.2) являють собою цільові функції, (5.3) – (5.5) – це обмеження, які визначають межі факторного простору. Припустимо, що потрібно максимізувати міцність або пластичність. Тобто потрібно знайти таке поєднання значень факторів, при яких σ_{θ} або δ приймають максимальні значення. В такому випадку математичне формулювання задачі оптимізації включає в себе одну з цільових функцій та додаткові умови (5.3) – (5.5). Розв’язок такої задачі не має значних ускладнень. В той же час, якщо потрібно одночасно знайти максимальні значення показників міцності і пластичності, немає жодної впевненості, що цільові функції досягають максимуму в одній точці факторного простору. Така задача має назву “задача багатокритеріальної оптимізації” [6].

У задачі багатокритеріальної оптимізації постає таке важливе поняття, як оптимальний план. З позицій математики такого плану не існує, адже загалом не існує такого плану, який би давав можливість одночасно знайти

максимуми двох довільних функцій. Тому методи вирішення задачі багатокритеріальної оптимізації передбачають, у тому чи іншому вигляді, врахування думки особи, яка приймає рішення (ОПР). Як ОПР виступає фахівець в даній галузі знань, наприклад, матеріалознавець. Пояснимо роль ОПР на прикладі двох методів, які часто застосовують при вирішенні таких задач.

Метод зведення двох критеріїв до одного. Ідея методу полягає в тому, щоб звести кілька (у нашому випадку – два) критерії в один. Для реалізації цього ОПР повинен "зважити" відносну важливість для себе кожного з критеріїв. Тобто ОПР повинен вибрати, з міркувань конкретної технології, числа α_1 та α_2 , а потім – побудувати єдину цільову функцію:

$$F = \alpha_1 f_1(x_1, x_2, \dots, x_k) + \alpha_2 f_2(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (5.6)$$

де

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1.$$

Якщо $\alpha_2 = 0$, то враховується тільки перша частина цільової функції (5.6), а друга частина цільової функції (5.6) – виключається з розгляду. Якщо $\alpha_1 = 0$, то картина зворотна. Глибоке знання реальної ситуації та накопичений досвід дають змогу ОПР вирішити проблему, вибравши величини α_1 та α_2 таким чином, щоб розв'язати оптимізаційну задачу з єдиною цільовою функцією F .

По суті, за наявності труднощів при вирішенні двокритеріальної задачі, вона замінюється на однокритеріальну, яка легко розв'язується. За наявності трьох і більше цільових функцій зростає кількість чисел α_j , значення яких ОПР повинен обґрунтувати і визначити. В цьому випадку аргументованість вибору α_j значно ускладнюється. Сума всіх чисел α_j повинна дорівнювати одиниці, а величини часток від одиниці, які вони повинні приймати, не зовсім очевидні.

Метод послідовних поступок. Нехай існує задача (5.1) – (5.3).

Зважаючи на те, що одночасно неможливо отримати обидва максимуми функцій (5.1) та (5.2), ОПР здійснює вибір більш суттєвої, на його думку, властивості для даного технологічного процесу. Цільовим функціям присвоюється певний рейтинг, наприклад, виходячи із важливості властивості в технологічному процесі (іншими словами – розставляються пріоритети). Нехай, наприклад, це буде міцність. Проте для величини другої властивості ОПР задає додаткову умову, виходячи із потреб конкретної технології. Наприклад, показники пластичності повинні бути не нижчими від деякої заданої величини. Тоді задача перетворюється на задачу одновимірної оптимізації, яка включає лише одну цільову функцію (5.1) з іще однією додатковою умовою:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_B = f_1(x_1, x_2, \dots, x_k), \\ \delta \geq \delta_{max}, \\ x_{1max1min}, \\ x_{2max2min}, \\ \dots, \\ x_{kmaxkmin}. \end{array} \right. \quad (5.7)$$

Нехай після виконання звичайної задачі одновимірної оптимізації за наявності обмежень знайдено максимум при певних значеннях параметрів $x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*$. Далі слід перевірити виконання додаткової умови (в нашому випадку – накладеної на пластичність $\delta \geq \delta_{max}$). Для цього знайдені значення параметрів моделі $x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*$ підставляють у рівняння (5.2) і розраховують величину δ . Якщо нерівність $\delta \geq \delta_{max}$ виконується, то розв'язок задачі (5.7) знайдено. Це означає що знайдено і розв'язок задачі (5.1) – (5.5).

Якщо нерівність $\delta \geq \delta_{max}$ не виконується, то ОПР робить поступку. Він погоджується, щоб перша властивість була не максимальною, а відрізнялась б від максимуму не більше ніж, наприклад, на 10%. Після цього знову розв'язується задача одновимірної оптимізації. Так повторюється доти, поки додаткова умова по другому відгуку не буде виконаною. Якщо після низки послідовних ітерацій розв'язок задачі не знайдено, то можна переглянути додаткову умову, тобто ОПР може перевизначити величину δ_{max} . Нарешті остаточні результати оптимізації слід проаналізувати. В разі їх прийнятності, проблема вважається вирішеною. При незадовільних результатах можна, наприклад, змінити досліджуваний матеріал і все повторити спочатку, включаючи дослід.

За наявності більше, ніж двох цільових функцій, математичне формулювання задачі багатокритеріальної оптимізації доповнюється ще кількома додатковими умовами. Їх кількість повинна співпадати зі зменшеною на одиницю кількістю цільових функцій. Для кожної із властивостей матеріалу, які мають нижчий пріоритет, потрібно визначити їх граничне значення. Перевірка додаткових умов здійснюється в порядку, який відповідає їх рейтингу. Цю задачу ОПР виконує стосовно певної конкретної технології, спираючись на власні знання і досвід.

Варто окремо наголосити, що в ході пошуку оптимального плану при багатокритеріальній оптимізації, крім формалізованого алгоритму, постають такі поняття, як "досвід" та "перевага". Це включення "людського фактора", яке на перший погляд видається дивним, є цілком доречним і природним.

За наявності трьох і більше цільових функцій, кількість розрахунків в ході багатокритеріальної оптимізації значно зростає. Тому розрахунки бажано здійснювати із застосуванням комп'ютера. Враховуючи можливості сучасних комп'ютерів, при вирішенні задач багатокритеріальної оптимізації можна застосовувати прості методи оптимізації, які в теорії вважаються малоефективними, наприклад, метод загального пошуку. Фактично цей

метод являє собою повний перебір різних варіантів. Наприклад, відгук σ_v визначено як головний, а для другого – задана умова $\delta \geq \delta_{max}$. Програмними засобами неважко організувати розрахунок значень цільових функцій для σ_v і δ при почерговій зміні значень факторів $x_1, x_2, \dots, x_k$ з заданими кроками по кожному з них. Крок зміни кожного з факторів задається точністю їх визначення в експерименті. Розраховані значення відгуків і задані значення факторів записують у відповідні масиви для повного циклу розрахунків. Після цього визначають максимальне значення головного відгуку σ_v . За індексом елементу масиву для σ_v , який відповідає цьому найбільшому значенню визначають вже розраховані значення другого відгуку δ і відповідні значення факторів. Потім перевіряють додаткову умову для другого відгуку і якщо вона виконується (тобто $\delta \geq \delta_{max}$), розрахунки припиняють. Якщо додаткова умова не виконується, в комірку масиву головного відгуку зі знайденим максимальним значенням σ_v записуються нуль або якесь від’ємне число і знову знаходять найбільше значення σ_v . Так повторюють допоки не буде знайдено максимальне значення σ_v при виконанні умови $\delta \geq \delta_{max}$. Якщо такого поєднання факторів не знайдено, слід переглянути додаткову умову у бік її послаблення і повторити розрахунки.

Метод загального пошуку можна дещо модифікувати за допомогою більш раціонального вибору кроків розрахунку. Для цього величини кроків зміни значень факторів вибирають в кілька разів більшими, ніж необхідна точність. Після серії розрахунків визначають область факторного простору, в якій міститься екстремум. Границі цієї області визначають нову зону пошуку екстремуму, в якій повторно визначають вже зменшені кроки розрахунків. Так можна повторювати поки не буде досягнута потрібна точність.

Таким чином, через наявність особи, яка приймає рішення (ОПР), та застосування логіко-математичних прийомів створюється можливість

вирішення задачі багатокритеріальної оптимізації, яка не має математичного розв'язку.

Порядок виконання роботи

За наданим викладачем набором експериментальних даних побудувати математичні моделі властивостей матеріалів. Сформулювати задачу багатокритеріальної оптимізації. Розробити комп'ютерну програму, що реалізує метод послідовних поступок і загального пошуку. За її допомогою вирішити задачу багатокритеріальної оптимізації. Дані для розрахунків наведені в додатку Г. Для проведення розрахунків потрібно:

1. Побудувати математичні моделі властивостей матеріалів.
2. Сформулювати і записати задачу багатокритеріальної оптимізації.
3. Виходячи з потрібної точності (встановлюється ОПР, в даному випадку – студентом), визначити кроки зміни факторів для розрахунку значень цільових функцій.
4. Розробити комп'ютерну програму для розрахунків цільових функцій і реалізації методу загального пошуку. Для цього потрібно:
 - а) для відгуків та факторів задати розмірність та описати масиви;
 - б) організувати розрахунки значень цільових функцій при циклічній зміні факторів із заданими кроками та записати результати у відповідні масиви;
 - в) визначити максимальний елемент та індекс масиву, який відповідає головному відгуку, і записати у відповідну комірку;
 - г) перевірити додаткову умову для другого відгуку, застосовуючи розраховані значення та записаний індекс. В разі виконання додаткової умови – вивести результати обчислень. Якщо умова не виконується, – записати у комірку масиву головного відгуку з максимальним елементом нуль і повернутися до пункту в). Кількість записаних нулів бажано запам'ятовувати. Якщо вона досягне розмірності масиву, це означає що

розв'язок не знайдений. Після цього слід зупинити виконання програми з відповідним повідомленням.

5. Сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Що мають на увазі під терміном “багатокритеріальна оптимізація”?
2. В чому полягає особливість розв’язку задачі “багатокритеріальної оптимізації”?
3. Які логічні підстави залучення ОПР?
4. У чому полягає метод зведення багатьох критеріїв до одного?
5. В чому полягає метод послідовних поступок?
6. В чому полягає метод загального пошуку?

ПІДГОТОВКА ІМІТАЦІЙНИХ МОДЕЛЕЙ КРИСТАЛІЗАЦІЇ МЕТАЛІВ І СПЛАВІВ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

Мета роботи: опанувати методику підготовки імітаційної моделі кристалізації металів “KRISTAL-1” для проведення комп'ютерних експериментів

Теоретичні відомості

Імітаційне моделювання. За результатами аналізу процесу формування полікристалічної структури металів можна стверджувати про неможливість математичного формулювання задачі, яка б давала можливість описати процес саме структуроутворення. Якщо в розплаві виникло, наприклад, 100 центрів кристалізації (що не є такою значною кількістю), то зростання кожного із них в рамках класичної задачі Стефана, слід описати рівняннями теплопровідності. До цього рівняння потрібно додати початкову умову, умови на границях всієї системи. Подібну математичну постановку задачі теплопровідності потрібно записати для всіх зростаючих кристалів. Якщо розглядається кристалізація сплавів, то потрібно додати ще і рівняння дифузії з відповідними початковими та граничними умовами. Загальна математична задача, в цьому випадку, виростає до кількох сотень рівнянь у частинних похідних із ще більшою кількістю додаткових умов. Окрім того, ще слід врахувати механічну взаємодію зростаючих кристалів, фільтрацію рідкої фази, тобто ефекти, які мають місце на останніх етапах процесу. За бажання таку математичну систему сформулювати можна, але розв'язати її практично неможливо.

При дослідженні структуроутворення в ході кристалізації ми маємо справу із системою, яка характеризується великим числом критеріальних

параметрів, а також складністю взаємозв'язків між ними і наявністю нелінійних обмежень. Тому її слід розглядати як складну систему. Складні системи досліджують в науці, яка має назву “системний аналіз”. В системному аналізі впроваджено порівняно новий метод моделювання, який отримав назву імітаційне моделювання (від англійського “simulation modeling”) [7]. Суть імітаційного моделювання, полягає в тому, що функціонування складної системи подають у вигляді певного алгоритму, який реалізується як комп'ютерна програма. За результатами реалізації такої комп'ютерної моделі можна зробити відповідні висновки стосовно вихідного процесу.

Імітаційна модель принципово відрізняється від математичної. Це можна спостерігати, виділивши основні етапи її побудови. На першому етапі формують основні питання про поведінку складної системи, відповіді на які необхідно отримати. Безліч цих питань дає змогу задати безліч параметрів, які характеризують стан системи (так звані вектори стану).

На другому етапі розкладають систему на більш прості частини – блоки. В один блок об'єднують "споріднені", тобто перетворені за близькими правилами, компоненти вектору стану і процеси, що їх перетворюють.

На третьому етапі формують закони і гіпотези про поведінку як системи в цілому, так і окремих її частин. Важливо зазначити, що в кожному блоці можна застосовувати різний математичний апарат (алгебраїчні і диференціальні рівняння, математичне програмування та ін.). Саме блоковий принцип дає можливість при побудові імітаційної моделі встановлювати необхідні пропорції між точністю опису кожного блоку, забезпеченістю його інформацією і необхідністю досягнення мети моделювання.

Також слід наголосити, що, залежно від поставлених перед дослідником завдань, вводиться параметр, який називається системний час. Він моделює перебіг часу в реальній досліджуваній системі.

На четвертому етапі формалізованим чином задають необхідні феноменологічні властивості системи і окремих її частин. Трапляються випадки коли на сучасному рівні знань ці властивості взагалі не можуть бути обґрунтовані. Тоді розробники моделі спираються на інформацію, яка отримана за допомогою тривалого спостереження за системою. (Саме таку ситуацію ми маємо при дослідженні кристалізації).

Здійснення двох останніх з перелічених етапів найбільш просто реалізується на комп'ютері, тому під імітаційною моделлю системи зазвичай мають на увазі комплекс комп'ютерних програм, опис функціонування окремих блоків системи і правил взаємодії між ними.

За умови достатньо глибокого знання поведінки реальної системи і правильного подання феноменологічної інформації, імітаційні моделі виявляються більш близькими до реальності, порівняно з математичними моделями. Чималою мірою така близькість обумовлена тим, що блоковий принцип побудови імітаційної моделі (принцип розщеплення) дає змогу верифікувати кожний із блоків до його включення в загальну модель, а також тим, що вона може включати залежності більш складного характеру ніж ті, що описують простими математичними співвідношеннями.

В комп'ютерних практикумах №6 - №10 подані імітаційні моделі кристалізації чистих металів та подвійних сплавів. Ці моделі дають змогу досліджувати утворення структури матеріалу, застосовуючи методологію імітаційного моделювання та клітинні автомати, які описуються в синергетиці. При їх створенні кристалізація розглядається як деяка система, що характеризується складною поведінкою і наявністю великої кількості компонентів, які взаємодіють між собою. Відтворення імітаційною моделлю поведінки цих компонентів і їх взаємного впливу дає змогу "подивитись" на систему зсередини, та прогнозувати поведінку як окремих її компонентів, так і системи в цілому.

Імітаційні моделі і клітинні автомати, як засіб їх реалізації, сьогодні є одним із найбільш перспективних напрямків в розвитку моделювання

різноманітних процесів і систем. Вони дають змогу більшою мірою дослідити їх поведінку за допомогою широкого застосування можливостей числового експерименту і цифрових обчислювальних машин.

При дослідженні кристалізації як в теоретичному плані, так і для розробки технологічних заходів, великий науковий і практичний інтерес представляє саме визначення оптимальних шляхів управління зростанням кристалів. Таку можливість надає моделювання структуроутворення при кристалізації і прогноз властивостей майбутнього виливка. Під засобами управління перебігом фазового перетворення (тобто кристалізацією) розуміється, перш за все, зміна вихідного стану розплаву та зовнішніх умов охолодження. Для цього еволюція клітинного автомату "підпорядкована" класичним тепловим законам [8].

Імітаційна модель кристалізації.

Для аналізу перебігу формування структури металу при кристалізації можна залучити прийоми, які застосовують в синергетиці, адже в цій науці розглядається утворення структур в складних системах. Одним з об'єктів досліджень тут є розподілені активні середовища або однорідні мережі, побудовані з однакових елементів, які локально взаємодіють один з одним. В активних середовищах розглядають мережі з бістабільних (або тригерних) елементів, які можуть перебувати в двох стаціонарних станах (наприклад, 0 і 1). У кожному з цих станів окремий елемент може перебувати як завгодно довго. Зовнішній вплив може призводити до переходу з одного стану в інший. Між даними варіантом збудливого елемента і розплавом, який кристалізується, можна провести аналогію. Згідно з цією аналогією розплав можна розглядати як активне середовище, що складається з бістабільних елементів, кожен з яких може перебувати або в рідкому, або у твердому стані. Поширення фронту кристалізації видається дуже схожим на рух хвилі перемикання, яка поширюється в бістабільному клітинному автоматі. (Рис. 6.1). Хвиля перемикання в ланцюзі зв'язаних між собою бістабільних елементів кліткового автомату описується рівнянням:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a\Delta U(r, t) + F(r, t), \quad (6.1)$$

де $U(r, t)$ та $F(r, t)$ - деякі потенціальні функції; a - коефіцієнт; r - просторова координата; t - час. Але таке ж рівняння лежить в основі багатьох математичних моделей кристалізації і якщо функцію $U(r, t)$ замінити температурою системи $T(r, t)$, то воно стає рівнянням теплопровідності. Коефіцієнт a в цьому випадку набуває змісту коефіцієнта температуропровідності, а функція $F(r, t)$ описує виділення теплоти кристалізації.

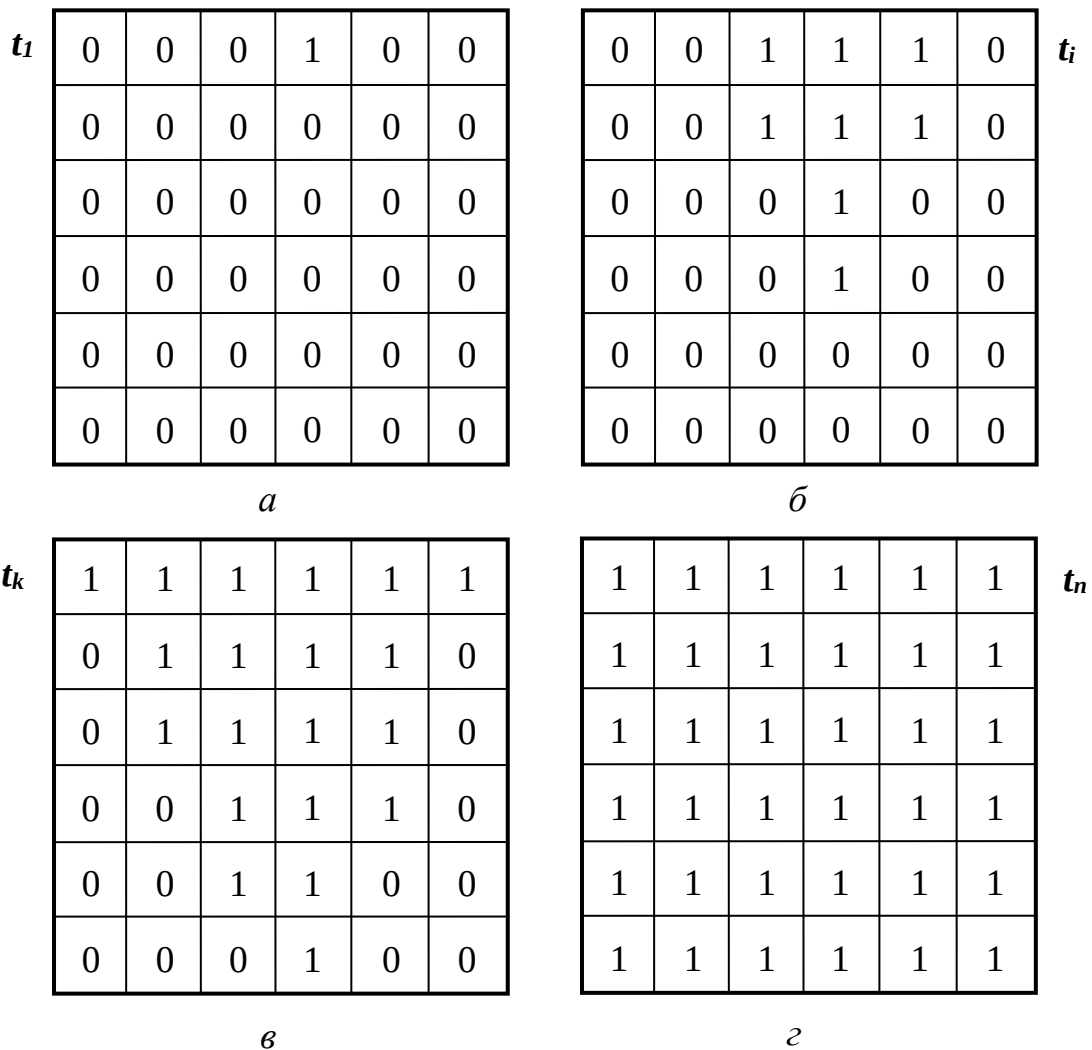


Рис. 6.1. Схема поширення хвилі переключень у двовимірному активному середовищі, яке складається з бістабільних елементів: $a, b, в, г$ – стани кліткового автомата в різні моменти часу t_1, t_i, t_k, t_n

Розглядаючи для побудови імітаційної моделі кристалізацію чистого металу або бінарного сплаву, можна виділити основні макрофізичні процеси, що визначають її перебіг. По-перше, це теплопередача, яка відбувається в об'ємі розплаву під впливом зовнішніх факторів. Під мається на увазі тепловий потік з поверхні форми з розплавом, який спрямований від нагрітого тіла в навколишнє середовище. Саме він зумовлює певну швидкість охолодження в системі і температурний градієнт в ній. Можна стверджувати, що саме тепловий потік є визначальним, адже одним з найважливіших параметрів при формуванні структури є температурний градієнт. Тому основним блоком, який задає динаміку роботи моделі, має бути блок визначення температурного поля металу або сплаву (тобто значення температури в довільній точці простору системи в довільний момент часу) впродовж всього процесу. У його основу доцільно покласти рівняння теплопровідності Фур'є. При формулюванні граничних умов, попри відносно високі температури, характерні для промислових розплавів, для спрощення математичного формулювання завдання, радіаційною складовою тепловіддачі з поверхні системи можна знехтувати.

Другим найбільш істотним фізичним явищем в даному випадку є дифузійний перерозподіл компонентів розплаву. Біля межі розділу "тверде - рідке" відбувається зміна складу рідини внаслідок різної розчинності другого елемента в рідкому і твердому станах і його подальший перерозподіл в просторі системи.

Кількісні значення зміни складу рідкої фази при виділенні другого компонента сплаву можна визначити за допомогою введення в модель відповідної діаграми стану сплаву з її характеристичними точками. Наступна апроксимація ліній ліквідус та солідус дасть змогу розрахувати необхідні зміни складу рідини після локальних фазових перетворень.

Для опису дифузії другого компонента в рідині застосовують рівняння Фіка. Граничні умови в цьому випадку повинні припускати відсутність обміну речовиною на границях системи. Нерівномірність концентрації

другого компонента в рідині, яка обумовлена "розділової дифузії", враховується за допомогою зміни початкових умов при кожному новому "тику" системного часу, тобто на кожному дискретному часовому етапі обчислень. Системний час, який є спільним для всіх блоків моделі (алгоритму), синхронізує роботу всього алгоритму і має дискретний характер.

Температура і концентрація другого компонента в кожній із точок розплаву в даний момент часу визначають розмір локального переохолодження, яке розраховується як різниця між температурою в цій точці і температурою ліквідус. Переохолодження в рідкому стані є основною рушійною силою кристалізації. При його наявності з'являються умови для утворення нового кристала або зростання вже наявного. Відомо, що зростання вже існуючого кристала відбувається при менших переохолодженнях, ніж утворення нового. Тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного. Тому в імітаційній моделі вони функціонально розділені. Також, враховуючи флуктуаційну природу утворення центрів кристалізації, та зростання вже існуючих кристалів за нормальним механізмом (який є характерним для кристалізації металів) бажано привнести в моделювання цих процесів елемент випадку. Тому в моделі при управлінні клітинним автоматом застосовується генератор випадкових чисел.

Утворення твердої фази в певній точці системи супроводжується виділенням тепла кристалізації і зміною концентрації другого компонента в околі цієї точки. Ці ефекти враховують при розрахунках температури і складу на наступному часовому кроці.

Для того щоб імітаційна модель кристалізації відображала основні фізичні риси модельованого процесу, обрано імовірнісний тип клітинного автомату. У початковому стані температура розплаву перевищує температуру кристалізації або температуру ліквідус (далі для спрощення будемо говорити про температуру ліквідус). Внаслідок тепловіддачі в

навколишнє середовище температура розплаву зменшується і досягає точки ліквідус. Для початку кристалізації розплав має переохолодитися. Класична теорія кристалізації розглядає подальший перебіг цього процесу при певному постійному переохолодженні. Але в реальних умовах для більшості технологічних процесів швидкість охолодження значна. І в цьому випадку система перебуває в нестационарному стані. З одного боку тепло від об'єкта, в якому відбувається кристалізація, продовжує відводитися у навколишнє середовище. А з іншого, – починає виділятися прихована теплота кристалізації. Як правило, загальний тепловідвід в навколишнє середовище перевищує тепловий потік, який виникає внаслідок утворення твердої фази. Тому переохолодження, як принаймі не зникає, а, швидше за все, збільшується. Формується деяка зона простору, в якій існує переохолодження. Його величина змінюється як у просторі, так і в часі. Цю зону з переохолодженням за аналогією, про яку йшлося вище, можна розглядати як активне середовище. І дійсно, рідка фаза в даному місці перебуває у нестійкому стані і будь-яка флуктуація може змінити фазовий стан довільного елемента простору - призвести до утворення початкового кристалу. При цьому умови для його подальшого зростання зберігаються через наявне переохолодження, яке також зберігається. Можна говорити про принципову нелінійність даного процесу. Так точка простору, в якій здійснився такий фазовий перехід, є точкою біфуркації, тобто точкою втрати стійкості, а це явище є нелінійним.

Інтерфейс програмної реалізації імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації чистих металів виводить візуальну інформацію про структуру твердої фази; та змодельовану криву охолодження. Вихідною інформацією є:

- файли, в які в ході роботи програми записуються, а саме: температура в центральній точці на кожному кроці розрахунку, кількість центрів кристалізації і швидкість їх росту, кількість твердої фази і швидкість її зростання, величина градієнта температур по перерізу системи;

- картинка, яка моделюється клітинним автоматом і являє собою вікно виводу в кольоровому або чорно-білому варіантах;
- кількісна оцінка розміру величини зерна.
- Інтерфейс програмної реалізації комп'ютерної моделі кристалізації бінарних сплавів з евтектикою додатково має вікна індикації:
 - "тверде - рідке";
 - "доевтектичний - заевтектичний" склад сплаву.
- Також формуються додаткові файли:
 - наявність переохолодження по площині системи;
 - розподіл концентрації другого елемента в твердому сплаві по перерізу виливка.

Також наявна додаткова опція, яка передбачає можливість зупинки виконання програми і зміни деяких параметрів налаштування моделі (вони залишаються позначеними чорним кольором). Ця опція дає змогу здійснювати пошукові експерименти при розробці нових технологій ливарного виробництва.

Таким чином, розроблені комп'ютерні імітаційні моделі дають змогу досліджувати перебіг кристалізації, формування первинної структури матеріалів при рівноважних і нерівноважних умовах. Вони зручні і наочні.

Алгоритм імітаційної моделі кристалізації.

Як зазначалося імітаційна модель кристалізації, що відбиває фізичні процеси виникнення і росту кристалів у розплаві під впливом зовнішніх умов, являє собою певний алгоритм. Зазвичай будь-який алгоритм, призначений для проведення розрахунків, починається з вводу початкових даних. В даному випадку слід ввести: параметри для теплової та дифузійної задач та параметри числових схем їх розв'язків; температуру кристалізації або характерні точки діаграми стану відповідного сплаву; теплофізичні характеристики металу або сплаву; геометричні розміри; наявність і кількість модифікатора (твердих часток) в розплаві; вплив (або його відсутність) стінок форми. Тому загальна блок-схема (рис. 6.2 та 6.3)

алгоритму імітаційної моделі кристалізації бінарного сплаву починається з блоку 1 (рис. 6.2).

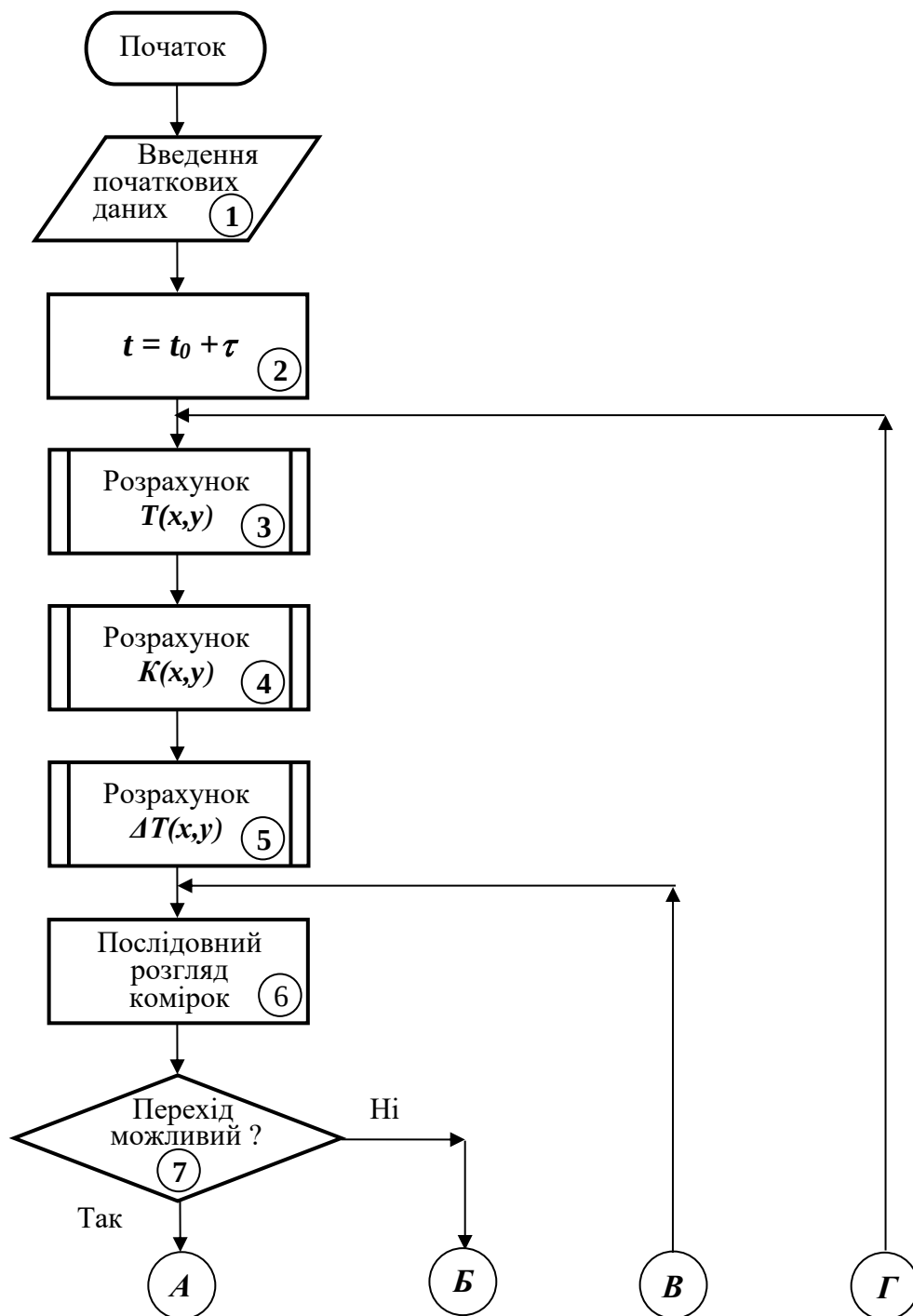


Рис. 6.2. Блок-схема загального алгоритму імітаційної моделі утворення структури при кристалізації

В якому здійснюється введення початкової інформації, до якої належать:

- початкова температура у середині розплаву;
- температури навколишнього середовища з чотирьох сторін;
- коефіцієнти тепловіддачі з чотирьох сторін;
- теплофізичні характеристики металу (густина, питома теплоємність, питома прихована теплота кристалізації, коефіцієнт теплопровідності);
- геометричні параметри (довжина та ширина досліджуваного об'єкта);
- час спостереження;
- інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації;
- інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів;
- максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації;
- максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів;
- емпіричний коефіцієнт адаптації;
- температура закінчення розрахунків;
- вміст модифікатора (першого роду) в рідкому металі;
- вплив стінок виливниці.

В імітаційній моделі кристалізації сплавів додатково вводиться:

- коефіцієнт дифузії (для моделі кристалізації сплаву);
- характерні точки діаграми стану сплаву з евтектикою (температура кристалізації чистого металу, температура кристалізації евтектики, початковий склад сплаву, склад евтектики, максимальна розчинність).

Розмірність всіх вхідних даних алгоритму імітаційної моделі відповідає системі СІ.

В блоці 2 алгоритму (Рис. 6.2) починається розрахунок і до початкового часу t_0 додається перший часовий інтервал τ зміщення в системному часі моделі (або перший “тік” системного часу). Потім послідовно розраховуються температура розплаву $T(x,y)$ (блок 3), концентрація другого компонента в розплаві $K(x,y)$ (блок 4) та величина переохолодження $\Delta T(x,y)$ (блок 5). Тут у вигляді підпрограм, які являють

собою реалізації числових схем, розраховуються математичні задачі та застосовується апроксимація діаграми стану. Визначивши температуру і концентрацію другого компоненту сплаву, можна розрахувати величину переохолодження в даний момент часу у даній точці.

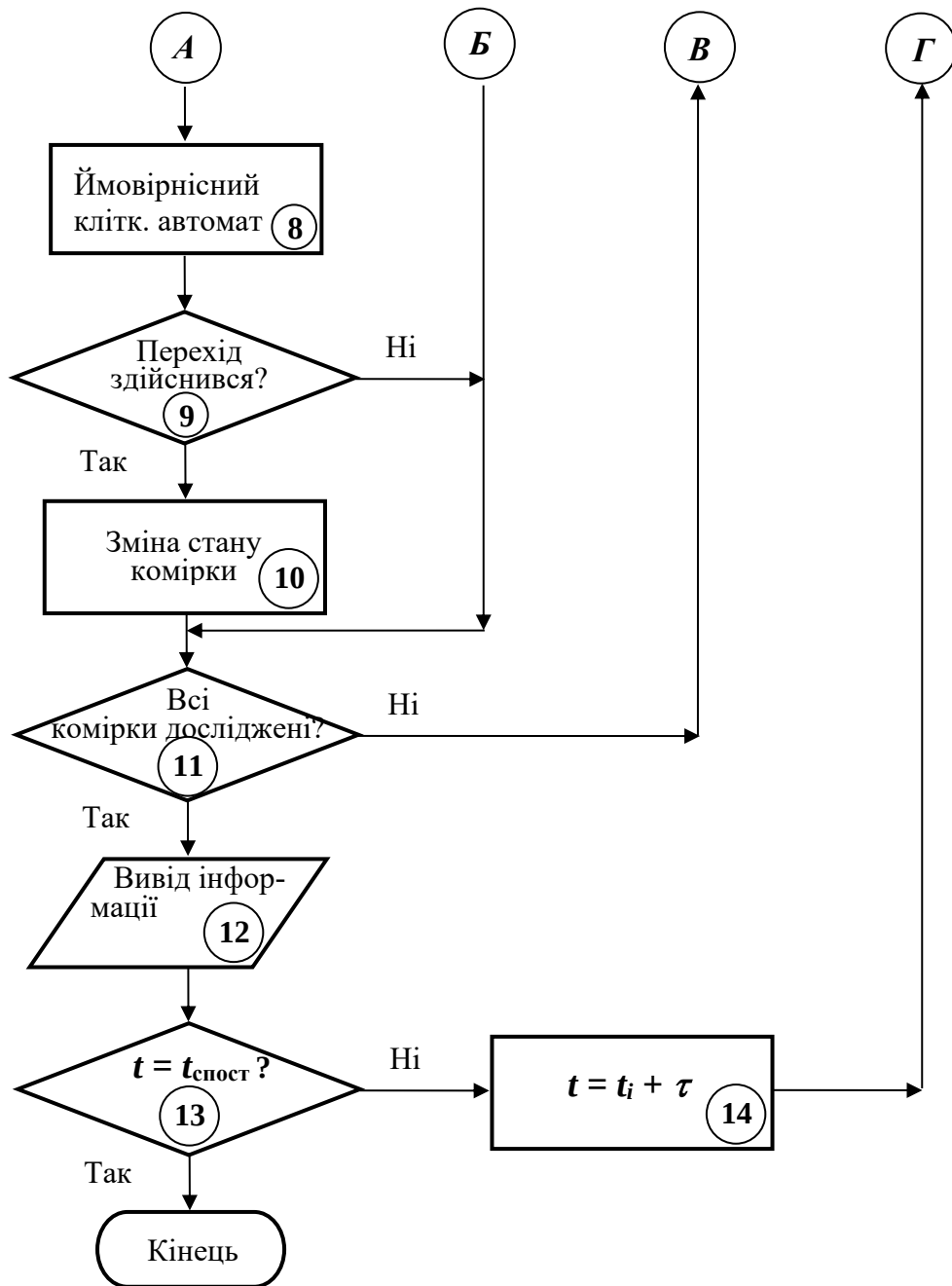


Рис. 6.3. Блок-схема загального алгоритму імітаційної моделі утворення структури при кристалізації

В рамках даної моделі метал, що твердіє, розглядається як двовимірний масив, кожен з елементів якого може бути або в рідкому, або в твердому станах. Блок 6 виконує певні диспетчерські функції, тобто послідовно організовує перегляд всіх точок. За наявності переохолодження виникає можливість фазового переходу “рідина – тверде тіло”. В блоці 7 здійснюється керування напрямком роботи алгоритму. Якщо фазовий перехід може відбутися, то залучається до розрахунків клітковий автомат (блок 8), якщо ні, то продовжується перегляд комірок (блоки 6 та 11).

В блоці 9 перевіряється стан комірки, яка є центральною в клітковому автоматі (блок 8), і якщо фазове перетворення здійснилось, то воно фіксується в блоці 10. Там же формується інформація про виділення прихованої теплоти кристалізації і зміну концентрації другого компонента в локальній області біля точки, в якій метал кристалізувався. Після того, як всі комірки будуть досліджені (блок 11), на монітор комп’ютера виводиться інформація щодо сформованої на цей момент часу структури металу, що кристалізується, а необхідні розрахункові величини заносяться у відповідні файли (блок 12). Розрахунки на даному інтервалі системного часу закінчилися. Перевіряється умова загального припинення обчислювань (блок 13). Якщо обчислювання потрібно продовжити, то системний час моделі збільшується на один інтервал τ або на один “тік” (блок 14) і виконання розрахунків передається на блок 3 з урахуванням інформації, що сформована в блоці 10.

Більш детально структура блоку 8, який реалізує клітковий автомат, подана на рисунку 6.4. Його робота починається з огляду найближчих сусідів комірки, в якій є переохолодження і можливе фазове перетворення (блок 8-1). Після цього приймається рішення: або з’являється новий центр кристалізації, або зростає вже існуючий кристал (блок 8-2). Зростання кристала відбувається при менших переохолодженнях ніж утворення нового зародка, тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного. Тому вони розділені. Якщо є хоч один "твердий сусід", то вважається, що

можливим є зростання вже утвореного кристалу. У протилежному випадку можливе зародження нового центра. Для підкреслення енергетичних розходжень процесів утворення і росту кристала вводяться деякі "бар'єри", розмір яких визначається переохолодженням у даній точці.

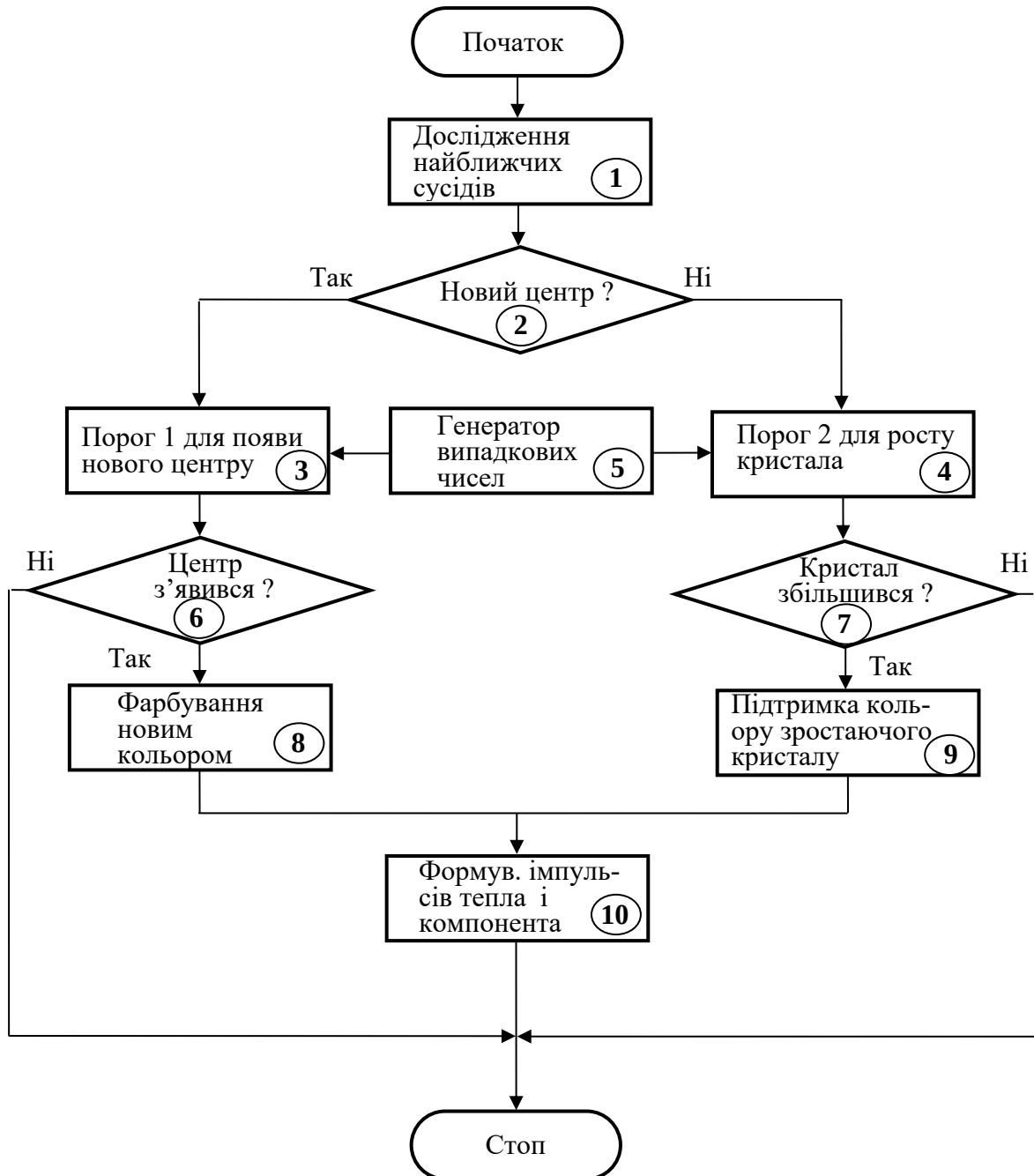


Рис. 6.4. Блок-схема ймовірного кліткового автомата імітаційної моделі кристалізації

Для визначення цих бар'єрів введено поняття максимальних переохолодження для швидкості утворення центрів кристалізації (n_c) $\Delta T_{\max 2}$

і для швидкості росту існуючого кристалу (v_k) $\Delta T_{\max 1}$. Тоді залежності основних параметрів кристалізації від переохолодження ΔT , які вважаються зростаючою функцією параболічного типу, можна апроксимувати лінійними функціями. При $\Delta T = \Delta T_{m2}$ або $\Delta T = \Delta T_{m1}$ ймовірність появи нового центру кристалізації чи зростання вже існуючого кристалу дорівнює одиниці. При $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \geq \Delta T_{m1}$ ймовірність утворення центра твердої фази дорівнює нулю, але може зростати вже існуючий кристал. За умови $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \leq \Delta T_{m1}$ фазові перетворення не відбуваються. Аналітично ймовірності пороги для утворення центрів кристалізації P_2 та для зростання вже існуючого кристала P_1 можна записати таким чином:

$$P_1 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m1}}, \quad (6.2)$$

$$P_2 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m2}}. \quad (6.3)$$

В блоках 8-3, 8-4 визначаються ці умовні “пороги” для кожної точки системи, в якій існує переохолодження. Співвідношення $\frac{\Delta T}{\Delta T_{m1}}$ та $\frac{\Delta T}{\Delta T_{m2}}$ являють собою “відносні переохолодження” окремо для можливостей появи нового центру кристалізації та зростання вже існуючого кристалу. Тобто вони визначають частку, яку складає переохолодження в даній точці до максимально можливого, що задається як евристичний параметр моделі.

Враховуючи флуктуаційний характер утворення кристалів та їх нормального росту в моделі застосовано генератор випадкових чисел (блок 8-5). Його застосування є характерною рисою імітаційної моделі. Після розрахунку відповідного бар'єра в блок 8-3 або в блок 8-4 потрапляє випадкове число і якщо воно перевищує цей бар'єр, відбувається фазове перетворення, тобто перехід даної точки зі стану "рідке" у стан "тверде". Для прояву на екрані комп'ютера структури, що формується, передбачається колірна диференціація перетворення, що відбулося. Якщо утворюється

новий цент кристалізації, він має новий колір (блок 8-8). Зростання існуючого кристала підтримується фарбуванням кольором "твердого сусіда" (блок 8-9).

Фазовий перехід супроводжується виділенням тепла кристалізації і підвищенням концентрації другого компонента в осередку даної точки. Формування відповідних "імпульсів" виконується в блоці 8-10, наявність котрих враховується в блоці 3 загального алгоритму при розрахунках теплового поля і концентрації другого компонента сплаву.

Вихідними даними (блок 12) є:

- файли, в яких в ході роботи програми записується:

- температура та її похідна в центральній точці на кожному кроці розрахунків для порівняння з реальною кривою охолодження (це потрібно для доведення адекватності моделі та контролю реального експерименту);
- градієнт температур по перерізу системи;
- кількість центрів кристалізації, що виникають при кристалізації;
- швидкість утворення центрів кристалізації в ході кристалізації;
- кількість твердої фази в ході кристалізації;
- швидкість зростання кількості твердої фази в ході кристалізації;

- кольорова картинка структури твердого металу, що моделюється клітковим автоматом та чорно-білий її варіант, який дає змогу контрастно виділити границі зерен металу в твердому стані;

- кількісна оцінка розміру зерна твердого металу.

Для одержання залежності швидкості утворення зародків від часу, додатково при перевірці наявності "твердих сусідів" якщо їх немає, фазове перетворення сталося, то збільшується на одиницю лічильник центрів кристалізації. По закінченню перевірки усіх комірок значення лічильника запам'ятовується, та скидається на нуль.

Порядок виконання роботи

Налаштувати імітаційну модель кристалізації металів “KRISTAL-1” для здійснення комп'ютерних експериментів. Перевірити коректність налаштування моделі, виконуючи комп'ютерні експерименти, в яких слід перевірити наявність зміни змодельованої структури при зміні параметрів моделі. Для проведення досліджень потрібно:

1. Запустити програму “KRISTAL-1” на виконання та провести налаштування моделі. Її вихідний інтерфейс показано на рисунку 6.5. Він складається з двох вікон і певної кількості кнопок управління. В лівому вікні (1 на рисунку 6.5) моделюється структура твердого металу, а в правому вікні (2 на рисунку 6.5) – крива охолодження.

Для налаштування моделі застосовується кнопка 3. Після її натискання слід ввести у відповідні три вікна параметри комп'ютерної моделі, які задають умови охолодження, теплофізичні характеристики металу, геометричні розміри системи, температуру початку кристалізації, наявність модифікатора та ще декілька параметрів, які мають евристичний характер (Рис. 6.6).

В першому вікні налаштування параметрів вводиться (Рис. 6.5 а):

- початкова температура розрахунків та температура їх закінчення (“Начальная температура” и “Конечная температура”);
- температура навколишнього середовища ліворуч (“Температура слева”);
- температура навколишнього середовища праворуч (“Температура справа”);
- температура навколишнього середовища знизу (“Температура снизу”);
- температура навколишнього середовища зверху (“Температура сверху”);

- коефіцієнт тепловіддачі ліворуч (“Коэф. теплоотдачи слева”);
- коефіцієнт тепловіддачі праворуч (“Коэф. теплоотдачи справа”);
- коефіцієнт тепловіддачі знизу (“Коэф. теплоотдачи снизу”);
- коефіцієнт тепловіддачі зверху (“Коэф. теплоотдачи сверху”).

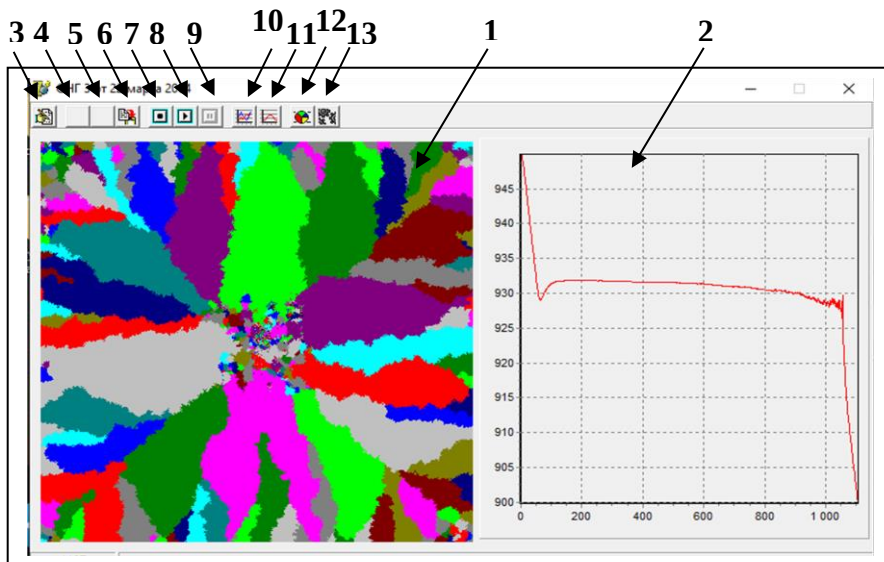


Рис. 6.5. Вихідний інтерфейс імітаційної моделі кристалізації металів: 1 - вікно, в якому відображається формування структури металу; 2 - вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження; 3 - вхід в налаштування моделі; 4, 5, 6 - кнопки фіксації результатів розрахунків (структура, крива охолодження, кількість центрів кристалізації та швидкість їх утворення, кількість твердої фази та швидкість її утворення; 7, 8 - початок роботи; 9 - зупинка роботи; 10, 11 - підключення експериментальної кривої охолодження; 12, 13- кнопки перемикавання зображення структури (кольорове або чорно-біле)

Варіювання зазначеними параметрами дає змогу моделювати умови охолодження майже для всіх типів лиття (в металева форму кокіль, в земляну форму тощо). При цьому головною характеристикою є швидкість охолодження, яка розраховується в моделі, і повинна відповідати реальним умовам. Такий підхід дає змогу не вводити в математичну задачу теплопровідності наявність ливарної форми (матеріал, з якого вона зроблена, особливості її геометричних параметрів і тому подібне).

В цьому ж вікні слід вести у відповідні вікна теплофізичні параметри металу, кристалізація якого моделюється (Рис. 6.6 а):

- питому теплоємність (“Удельная теплоемкость”);
- питому приховану теплоту кристалізації (“Теплота кристаллизации”);
- коефіцієнт теплопровідності (“Коэф. теплопроводности”);
- густину (“Плотность”).

При побудові математичної моделі теплопередачі ці параметри вважались сталими, хоча питома теплоємність, коефіцієнт теплопровідності та густина є функціями від температури. Тому в даному випадку в модель вводяться усереднені за температурним діапазоном охолодження значення.

Після цього потрібно ввести геометричні розміри системи (“Размер тела по X (м)”, “Размер тела по Y (м)”) та часовий інтервал розрахунків числової схеми задачі теплопровідності (“Время наблюдения”), який є одним “тіком” системного часу всієї імітаційної моделі (Рис. 6.6 а).

В другому вікні налаштування моделі вводиться температура кристалізації металу (“Темп. кристал. компонент. А [K]”) та наявність або відсутність модифікатора. Якщо в позиції “Концентрація модифікатора [%]” введено “0”, то модифікування металу відсутнє (Рис. 6.6 б). Будь-яке інше число показує скільки у відсотковому відношенні твердих частинок перебуває у рідкому металі на момент початку охолодження. У даному варіанті імітаційної моделі структура металу формується на екрані комп’ютера і складається з 400×400 пікселей (тобто 160000 елементів). Так, наприклад, значення кількості модифікатора встановлено 0,2%. Це означає, що у площині системи ($X \times Y$) в 160000 пікселей 320 з них є твердими ще до початку кристалізації ($0,002 \times 160000$). Тому якщо за умовами завдання необхідно дослідити вплив модифікатора, то потрібно ввести кількість модифікатора у відповідне вікно параметрів.

В третьому вікні налаштувань вводяться так звані, евристичні параметри (рис. 6.6 в):

- інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації (“Интервал метастаб. для центров [K]”;

Редактирование данных

TabSheet1 | TabSheet2 | TabSheet3

Начальная температура [K] 1031 Теплота кристаллизации 397000

Конечная температура [K] 940 Коэф. теплопроводности 213

Температура слева 298 Плотность 2700

Температура справа 298 Время наблюдения [] 0,1

Температура сверху 298 Размер тела по X [м] 0,025

Температура снизу 298 Размер тела по Y [м] 0,07

Коэф. теплоотдачи слева 310

Коэф. теплоотдачи справа 310

Коэф. теплоотдачи сверху 310

Коэф. теплоотдачи снизу 310

Удельная теплоемкость 1255

Да Нет

a

Редактирование данных

TabSheet1 | TabSheet2 | TabSheet3

Темп. кристал. компонент. A [K] 933

Концентрация модификатора [%] 0,2

б

Редактирование данных

TabSheet1 | TabSheet2 | TabSheet3

Интервал метастаб. для центров [K] 6

Мак. переохла. для центров [K] 50

Интервал метастаб. для роста [K] 0,1

Мак. переохла. для роста [K] 70

Коэф. пропорциональности 10500

☒ Учитывать пропорции образца

☐ Учитывать стенки отливки

в

Рис. 6.6. Параметры імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації чистого металу (Al): а) – які характеризують умови охолодження та властивості металу; б) – що зазначає стан рідкого металу;

- максимальне переохладження для утворення центрів кристалізації (“Мак. переохла. для центров [K]”);

- інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів (“Інтервал метастаб. для роста [K]”);
- максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів (“Мах. переохл. для роста [K]”);
- емпіричний коефіцієнт адаптації (“Коэффициент пропорциональности”).

Величина інтервалу метастабільності для росту кристалів відома і для металів складає приблизно 0,1 градуса. Величина інтервалу метастабільності для утворення центрів кристалізації в реальних умовах невідома і залежить від "стану" рідкого металу. Для металів за звичайних умов прийнято вважати що вона становить 3 – 5 градусів. Такі параметри, як максимальні переохолодження для утворення центрів кристалізації і для швидкості росту кристалів введені штучно. В даній моделі їх прийнято встановлювати на рівні 50 градусів.

Емпіричний коефіцієнт адаптації застосовують для “підлаштування” кількості тепла, яке виділяється при кристалізації та компенсації впливу інших наближень, які вводились при створенні моделі.

У цій групі даних є ще дві позиції (рис. 6.6 в): урахування впливу стінок виливниці (“Учитывать стенки отливки”) та урахування геометричних пропорцій вилівка (“Учитывать пропорции образца”). Їх сенс досить простий. Якщо в реальному експерименті стінки виливниці добре пофарбовані, то їхнім впливом на утворення зародків можна знехтувати. В протилежному випадку стінки “працюють” як запали для утворення центрів твердої фази. Друга позиція пов’язана з геометрією вилівка. В даній моделі його форма може бути або квадратною, або прямокутною.

Робота моделі починається після натискання послідовно кнопок 7 та 8. Коли розрахована температура системи досягає встановленої в параметрах температури закінчення розрахунків робота програми закінчується автоматично.

Натискання кнопок 4 та 5 дає змогу зберегти "картинки" модельованої структури і змодельованої кривої охолодження. Фіксацію зображень структури і кривої охолодження можна робити як по закінченню моделювання, так і в будь-який його момент.

Кнопка 6 дає змогу зберегти інформацію про утворення центрів кристалізації та їх кількості в ході кристалізації у відповідних файлах з розширенням ".txt". У файлі "Speed_I.txt" зберігається інформація про кількість утворених центрів кристалізації, а в файлі "Speed_I_dt.txt" – швидкість їх утворення. Файл "Speed_V.txt" зберігає інформацію про кількість твердої фази, а в файлі "Speed_V_dt.txt" міститься інформація про швидкість її утворення. Для перегляду цієї інформації застосовується комп'ютерна програма "TVGraf 0.0.006".

Кнопки 12 та 13 призначені для перемикання зображення структури на кольорове або чорно-біле.

3. Перевірити працездатність імітаційної моделі. Для цього слід запустити програму "КРИСТАЛ-1" на виконання. В ході її роботи зафіксувати зображення структури металу, яка формується при кристалізації, та файли, в яких зберігається інформація про утворення центрів кристалізації і кількості твердої фази. Для цього потрібно застосувати програму "TVGraf 0.0.0006". Її інтерфейс наведений на рисунку 6.7.

Насамперед слід встановити розширення ".txt". Після цього в нижньому вікні з'являться доступні для перегляду файли. Перед цим, за необхідності, можна вибрати папку, в якій зберігаються потрібні файли (верхнє вікно). Вибраний файл з допомогою "мишки" переміщується в основне вікно (в центрі). Далі можна застосовувати цифрову фільтрацію, чисельним методом розраховувати похідну і виводити її у центральне вікно. Також можна збільшувати окремі фрагменти досліджуваного файлу. Для цього потрібний фрагмент виділяється "мишкою".

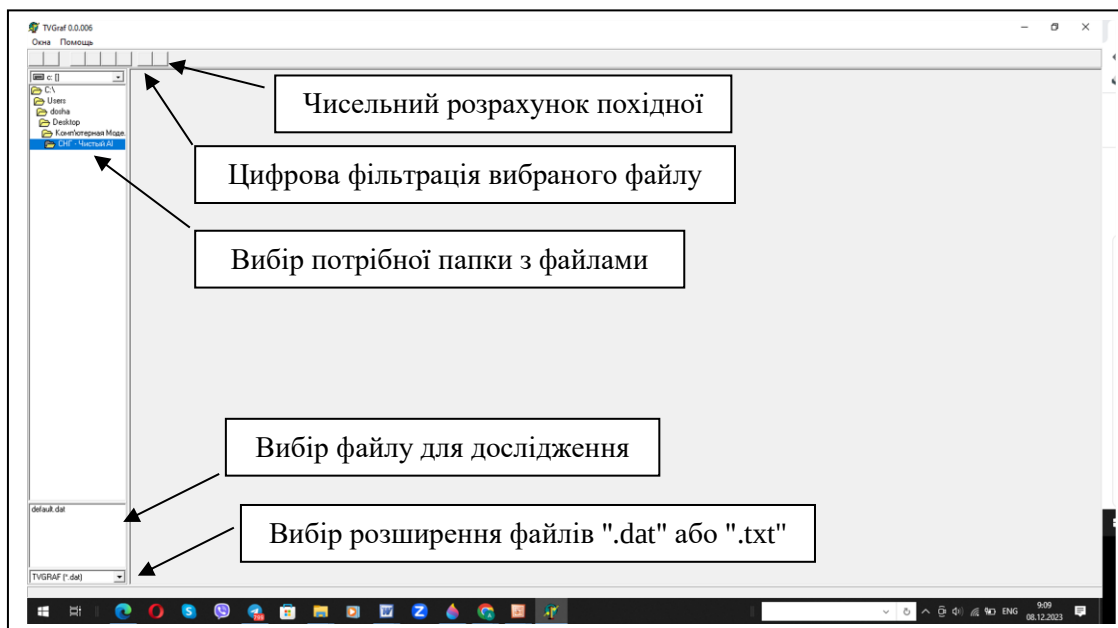


Рис. 6.7. Інтерфейс програми "TVGraf 0.0.0006"

В програмі передбачена можливість виводу у центральне вікно одночасно кількох файлів; це дає змогу їх сумісного аналізу.

4. Змінити швидкість охолодження за допомогою зміни коефіцієнтів тепловіддачі і повторити дії пункту 3.
5. Сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Чому формування структури металів і сплавів при кристалізації складно піддається математичному моделюванню?
2. Чим імітаційна модель принципово відрізняється від математичної?
3. Що являє собою імітаційна модель?
4. Які основні фізичні процеси відбуваються при кристалізації металів і сплавів?
5. Що вивчає синергетика?
6. Що являє собою клітковий автомат?
7. З якою метою в управлінні клітинним автоматом застосовують генератор випадкових чисел?

ВПЛИВ ШВИДКОСТІ ОХОЛОДЖЕННЯ НА УТВОРЕННЯ ОСЕРЕДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПРИ ГОМОГЕННІЙ КРИСТАЛІЗАЦІЇ

Мета роботи: дослідити вплив швидкості охолодження на утворення осередків твердої фази та структуру твердого металу при гомогенній кристалізації за допомогою комп'ютерної моделі “KRISTAL-1”

Теоретичні відомості

Кристалізація – це перехід металу з рідкого стану в твердий з утворенням кристалічної будови. Це первинна кристалізація (на відміну від вторинної, коли кристали виділяються з твердої речовини). Кристалізація обумовлена переходом системи до більш стійкого термодинамічного стану при даних тиску і температурі.

При зміні зовнішніх умов, наприклад температури, вільна енергія системи в рідкому і твердому (кристалічному) станах змінюється по-різному. За більш високої температури стабільним є рідкий стан, адже метал в цьому стані має менший запас вільної енергії. За нижчих температур менший запас вільної енергії має метал в твердому стані. При певній температурі величини вільних енергій твердого та рідкого станів рівні. Тому метал як завгодно довго може перебувати в рідкому, твердому або двофазному твердо-рідкому станах. В цих умовах перехід з одного стану в інший не буде супроводжуватися зміною вільної енергії. Ця температура отримала назву теоретичної температури кристалізації ($T_{кр}$).

Для початку кристалізації необхідно щоб вільна енергія металу в твердому стані стала меншою від вільної енергії в рідкому стані. Це стає можливим при охолодженні рідини нижче $T_{кр}$. Температура, при якій фактично починається процес кристалізації, називається фактичною температурою кристалізації. Охолодження розплаву нижче фактичної

температури кристалізації називається переохолодженням. Його величину оцінюють ступенем переохолодження, який є різницею між теоретичною і фактичною температурами кристалізації ($\Delta T = T_{\text{кр}} - T(t)$).

Ступінь переохолодження залежить від швидкості охолодження розплаву. Зі збільшенням швидкості охолодження зменшується фактична температура кристалізації і, отже, збільшується ступінь переохолодження.

Кристалізація починається з появи в розплаві центрів кристалізації і продовжується внаслідок збільшення їх числа і розмірів. Перебіг кристалізації можна охарактеризувати двома параметрами: числом центрів кристалізації ($n_{\text{ц}}$), які утворюються в одиницю часу в одиниці об'єму, і швидкістю росту кристалів ($v_{\text{ц}}$). Ці параметри залежать від ступеня переохолодження, а отже - від швидкості охолодження при кристалізації.

За теоретичної температури кристалізації значення $n_{\text{ц}}$ і $v_{\text{ц}}$ дорівнюють 0 і кристалізація відбуватися не може. При збільшенні ступеня переохолодження значення $n_{\text{ц}}$ і $v_{\text{ц}}$ також збільшуються і кристалізація відбувається швидко. Це пояснюється тим, що при високих температурах, близьких до $T_{\text{кр}}$, рухливість атомів велика. При певних ступенях переохолодження значення $n_{\text{ц}}$ і $v_{\text{ц}}$ досягають максимуму, після чого зменшуються через зменшення рухливості атомів при низьких температурах.

Розміри зерен, які утворилися в ході кристалізації, залежать від співвідношення між величинами $n_{\text{ц}}$ і $v_{\text{ц}}$, тобто визначаються ступенем переохолодження (швидкістю охолодження металу при кристалізації). При малих ступенях переохолодження (малій швидкості охолодження) утворюється невелика кількість центрів кристалізації, які зростають з великою швидкістю. Тому після закінчення кристалізації структура металу буде крупнозернистою. Навпаки, при великих ступенях переохолодження, $n_{\text{ц}}$ велике, а $v_{\text{ц}}$ мала, тому структура металу виходить дрібнозернистою. Якщо переохолодження настільки велике, що значення $n_{\text{ц}}$ і $v_{\text{ц}}$ близькі до нуля, то кристалізація не відбувається. При цьому утворюється тверде тіло,

що має не кристалічну будову з "правильним" розташуванням атомів, а аморфне – з хаотичним розташуванням атомів - "тверда рідина". Аморфний стан характерний для неметалічних матеріалів (скло, полімери). Для отримання аморфного стану у металевих матеріалів потрібна дуже велика швидкість охолодження ($10^6 - 10^7$ °C/c).

Порядок виконання роботи

За допомогою комп'ютерного експерименту дослідити вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації та структуру твердого металу при гомогенній кристалізації. Для цього потрібно встановити кілька величини швидкості охолодження в інтервалі від 0,5 до 6,0 °C/c і зафіксувати зміни в структурі твердої фази на початку та в кінці кристалізації. Після закінчення експерименту потрібно зберегти файли, які містять інформацію про кількість утворених центрів кристалізації та швидкість їх утворення. За допомогою комп'ютерної програми "TVGraf" проаналізувати відповідні зміни. Для проведення досліджень потрібно необхідно:

1. Запустити програму "KRISTAL-1" на виконання та налаштувати імітаційну модель кристалізації чистих металів, як зазначено у комп'ютерному практикумі №6.

2. Встановити швидкість охолодження 0,5 град/с. Для цього потрібно:

- зупинити виконання програми на початку кристалізації, коли температура на кривій охолодження стає близькою або трохи нижчою від встановленої температури кристалізації металу як показано на рисунку 7.1 (кнопка 9 на рисунку 6.4);

- зберегти криву охолодження в файлі, для чого цього слід натиснути відповідну кнопку моделі (кнопка 6 на рисунку 6.4);

- запустити програму "TVGraf", відкрити файл "Krv.txt", в якому зберігається модельована крива охолодження, і за нею розрахувати швидкість охолодження в даному експерименті, як показано на рисунку 7.2;

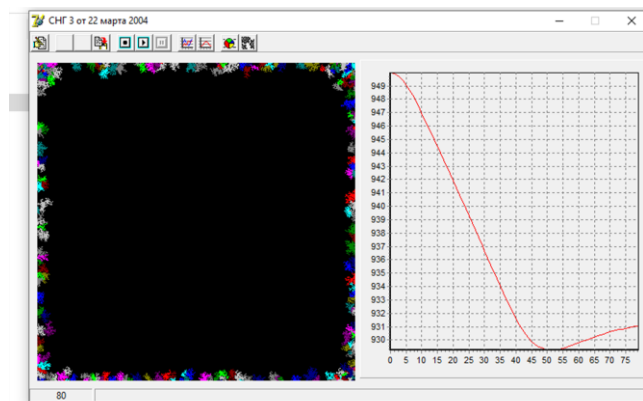


Рис. 7.1. Приклад зупинки роботи комп'ютерної програми для розрахунку швидкості охолодження

- за необхідності слід скорегувати коефіцієнти тепловіддачі таким чином щоб швидкість охолодження становила $0,5 \text{ }^{\circ}\text{C /c}$.

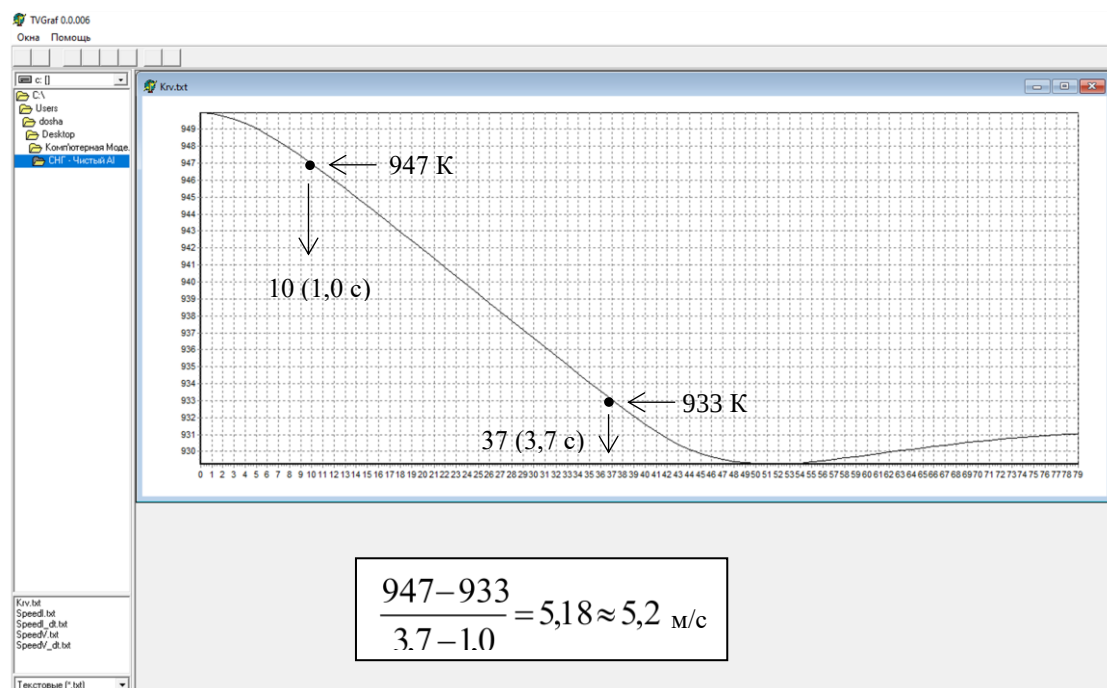


Рис. 7.2. Приклад розрахунку швидкості охолодження в комп'ютерному експерименті

3. Провести комп'ютерний експеримент, потім зберегти змодельовану структуру (кнопка 5 на рисунку 6.4) та інформацію про параметри кристалізації (кнопка 6 на рисунку 6.4). Ця інформація зберігається в файлах: "Krv.txt" – крива охолодження, "SpeedI.txt" – кількість утворених центрів кристалізації, "SpeedI_dt.txt" – швидкість утворення центрів

кристалізації, "SpeedV.txt" – кількість твердої фази, "SpeedV_dt.txt" – швидкість утворення твердої фази.

4. Повторити пункти 2 та 3, послідовно встановивши швидкості охолодження 1,0; 2,0; 4,0 та 6,0 °C /с.

5. Проаналізувати отримані результати.

6. Сформулювати висновки по роботі.

7. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Що з фізичної точки зору являє собою кристалізація?
2. Що вважається “рушійною силою” кристалізації?
3. Що мають на увазі під терміном «температура кристалізації»?
4. Що мають на увазі під терміном «ступінь переохолодження»?
5. Які параметри впливають на величину переохолодження?
6. Які параметри впливають на структуру металу в твердому стані?
7. Які умови необхідні для отримання аморфного стану у металевих матеріалах?

ВПЛИВ МОДИФІКАТОРА НА УТВОРЕННЯ ОСЕРЕДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ АЛЮМІНІЮ

Мета роботи: за допомогою комп'ютерної моделі “KRISTAL-1” дослідити вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації та структуру твердого металу за наявності модифікатора.

Теоретичні відомості

Модифікування металів – введення в розплави речовин які, майже не змінюючи хімічного складу, впливають на структуру литих металів, поліпшуючи їх властивості.

Модифікатори – речовини, які вводять при модифікуванні у розплави. Розрізняють модифікатори, які в розплаві є штучними центрами кристалізації (інокулятори), і модифікатори, які запобігають росту зерна (інгібітори). Модифікатори, перш за все, застосовують для одержання дрібнозернистої структури виливків. Їх кількість зазвичай не перевищує десятих часток процента.

Для виливків великої маси охолодження з великою швидкістю практично неможливе. Подрібнення зерна для отримання їх дрібнозернистої структури, яка характеризується більш високими показниками міцності і пластичності, порівняно з крупнозернистою, зазвичай досягають за допомогою модифікування. Модифікатор повинен мати той же тип і близькі параметри кристалічної ґратки (різниця не повинна перевищувати 15 % (правило Данкова), що і основний метал. Температура плавлення модифікатора повинна бути вищою за температуру кристалізації основного металу. Модифікаторами можуть бути метали, що утворюють при їх введенні в розплав тугоплавкі хімічні сполуки.

Модифікатори вводять у ківш або в струмінь розплаву, який випускають з печі, а також безпосередньо в ливарну форму.

Можливість комп'ютерного експерименту за наявності модифікатора в даній комп'ютерній моделі визначається в другому вікні налаштування (Рис. 6.5 б). Якщо в позиції "Концентрація модифікатора [%]" введено "0", то модифікування металу відсутнє. Будь-яке інше число показує скільки у відсотковому відношенні твердих частинок перебуває у розплаві на момент початку охолодження. Проте у даній моделі існує різниця в розумінні кількості введеного модифікатора в реальному експерименті і в комп'ютерному. На екрані комп'ютера структура металу, яка формується, складається з 400×400 пікселей (тобто 160000 елементів). Введене в налаштуванні моделі значення кількості модифікатора, наприклад, 0,2 % означає, що у площині системи ($X \times Y$) в 160000 пікселей 320 з них є твердими ще до початку кристалізації ($0,002 \times 160000$). По площині системи вони розподілені випадковим чином.

Порядок виконання роботи

За допомогою комп'ютерного експерименту дослідити вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації та структуру твердого металу за наявності модифікатора.

1. За допомогою підбору коефіцієнтів тепловіддачі встановити три різні величини швидкості охолодження, а саме: 2,0; 5,0 та 7,0 $^{\circ}\text{C} / \text{с}$, як показано у комп'ютерному практикумі №7.

2. При швидкості охолодження 2,0 $^{\circ}\text{C} / \text{с}$ провести комп'ютерний експеримент та зафіксувати зміни в структурі твердої фази на початку та в кінці кристалізації. Після завершення експерименту зберегти файли, які містять інформацію про кількість утворених центрів кристалізації та швидкість їх утворення.

3. В параметрах налаштування ввести 0,1 % модифікатора і повторити комп'ютерний експеримент, зберігши отримані результати.

4. Повторити комп'ютерні експерименти, встановлюючи швидкість охолодження послідовно 5,0 та 7,0 °C /с і кількість модифікатора 0,5 %, 1,0 % та 2 % для кожної з них.

5. За допомогою комп'ютерної програми "TVGraf" проаналізувати отримані результати, як описано у комп'ютерному практикумі №6.

6. Сформулювати висновки по роботі.

7. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Що являє собою модифікування металів?
2. Що таке модифікатори?
3. Якими бувають модифікатори?
4. Для чого застосовують модифікатори і в яких кількостях їх вводять в розплави?
5. Яким чином модифікатори вводять в розплави?

ВПЛИВ ШВИДКОСТІ ОХОЛОДЖЕННЯ НА УТВОРЕННЯ ЗАРОДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ СПЛАВУ Al-Si

Мета роботи: дослідити вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації та структуру сплаву Al-Si за допомогою комп'ютерної моделі "KRISTAL-2".

Теоретичні відомості

Імітаційна модель кристалізації сплавів значно складніша за комп'ютерну модель кристалізації чистих металів і потребує набагато більше обчислень. Окрім розрахунку зміни температури при охолодженні системи, потрібно розраховувати і зміну складу рідкої фази. Тому тут застосовані математичні моделі теплопровідності, дифузії та діаграми стану з евтектикою.

Загальний алгоритм імітаційної моделі кристалізації сплавів включає математичні моделі теплової та дифузійної задач. Розглянемо постановку внутрішньої задачі теплообміну, яка виникає при розрахунку охолодження прямокутної проби. Будемо вважати, що тіло є однорідним і воно характеризується постійними у всій розрахунковій області значеннями питомої об'ємної теплоємності $c' = \frac{c}{\rho}$ [Дж/(м³·К)] (тобто відношення питомої теплоємності до густини) і коефіцієнта теплопровідності q [Вт/(м·К)].

У основі математичного формулювання задачі теплопровідності, покладено закон збереження енергії, який виражається рівнянням:

$$c' = \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[q(x, y, t)] , \quad x, y \in G, \quad (9.1)$$

де $q(x,y,t)$, $T(x,y,t)$ - щільність теплового потоку та його температура в точці з координатами x, y в момент часу t ; G - розрахункова область простору.

Вважаючи, що теплофізичні параметри металу не залежать від температури (тобто $c, \rho, \lambda = \text{const}$) і, застосовуючи закон Фур'є,

$$q(x, y, t) = -\lambda \cdot \text{grad}[T(x, y, t)], \quad (9.2)$$

отримаємо рівняння теплопровідності, яке описує зміну температурного поля в часі:

$$c' \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \text{div}[\lambda \cdot \text{grad}[T(x, y, t)]], \quad (9.3)$$

де c - питома теплоємність; ρ - густина; λ - коефіцієнт теплопровідності.

При визначенні додаткових умов для рівняння теплопровідності (6.3) потрібно задати розподіл температури в початковий момент часу $T(x,y,0)$:

$$T(x, y, 0) = T(x, y), \quad x, y \in G \quad (9.4)$$

і сформулювати граничну умову, що виражає особливості теплообміну на поверхні, яка відокремлює область G від навколишнього середовища. При цьому передбачається співвідношення між температурою $T_w(x,y,t)$ і щільністю теплового потоку $q(x,y,t)$ на поверхні тіла (тобто гранична умова 3 роду):

$$q = f(T_w), \quad (9.5)$$

що описується законом Ньютона-Ріхмана. Тобто вважається, що тепловідведення в навколишнє середовище відбувається виключно внаслідок конвекції.

Тепер розглянемо постановку двовимірної задачі теплопровідності, яка виникає при розрахунку температури прямокутної заготовки та враховує виділення теплоти при фазових перетвореннях. Вважаємо, що охолодження тіла відбувається з усіх чотирьох сторін поверхні, а температурне поле змінюється лише в площині, перпендикулярній до осі тіла. Тобто розглядаємо нескінченно тонкий поперечний зріз прямокутного тіла.

В цій площині введемо систему координат OXY і позначимо через ∂x довжину тіла, а через ∂y – його ширину. Теплофізичні характеристики охолоджуваного металу не залежать від температури, тому для області $0 < x < \partial x$, $0 < y < \partial y$ запишемо рівняння теплопровідності (6.3) у такому вигляді:

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t) \quad (9.6)$$

де $a = \frac{\lambda}{c'}$ – коефіцієнт температуропровідності; $F(x, y, t)$ – додатковий член, який враховує виділення (чи поглинання) теплоти при фазовому перетворенні.

Фізичний зміст $F(x, y, t)$ досить ясний. Це “імпульс” тепла, який існує один “тік” системного часу в точці або в декількох точках, де відбулося фазове перетворення. Тобто загальний вигляд функції $F(x, y, t)$ весь час змінюється. Знак “+” відповідає кристалізації, а “-” – плавленню. Цей додатковий член може мати вигляд:

$$F(x, y, t) = \frac{L}{c} \cdot \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t} \quad (9.7)$$

де L – прихована питома теплота кристалізації (плавлення); $\varepsilon(x, y, t)$ – частка твердої фази в деякому елементарному об’ємі $\partial x, \partial y$.

Граничні умови з усіх сторін є граничними умовами 3-го роду (9.5), що відповідає постійним значенням температури навколишнього середовища $T_c = const$ і коефіцієнтів тепловідведення з чотирьох боків $\alpha_1 - \alpha_4$:

$$\frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_c], \quad (9.8)$$

$$\frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_c], \quad (9.9)$$

$$\frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_c], \quad (9.10)$$

$$\frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = \alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_c], \quad (9.11)$$

де $\alpha_1 - \alpha_4$ - коефіцієнти тепловідведення з чотирьох сторін.

Саме для такого вигляду граничних умов досить просто моделювати різні варіанти охолодження тіла, які зустрічаються на практиці. Наприклад, охолодження розплаву може відбуватися у металевій чи у піщаній формі, з усіх боків чи з одного або кількох та ін. Достатньо великий набір практично цікавих випадків можна отримати за допомогою зміни величин коефіцієнтів тепловідведення $\alpha_1 - \alpha_4$.

Припускаючи, що в початковий момент часу тіло є рівномірно прогріте до температури T_0 , запишемо більш детально початкову умову (9.4):

$$T(x, y, 0) = T_0 = const. \quad (9.12)$$

Отже математична постановка задачі для розрахунку температури в довільний момент часу в кожній із точок системи (тобто математична модель теплопровідності) складається з виразів (9.6) – (9.12) і разом вони складають математичну задачу (9.13):

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t),$$

$$\left\{ \begin{array}{l} T(x, y, 0) = T_0 = const, \\ \frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = \alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_c]. \end{array} \right. \quad (9.13)$$

Математичну модель дифузії можна побудувати майже аналогічним образом. Це пов'язано з тим, що рівняння теплопровідності Фур'є та рівняння дифузії Фіка розрізняють тільки за назвами досліджуваних процесів, (і, мабуть, швидше з історичних причин). За математичною класифікацією це єдине рівняння, яке належить до рівнянь у часткових похідних параболічного типу. Тобто за умови незалежності коефіцієнта дифузії D від координат та часу можна записати:

$$\frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \quad (9.14)$$

де $K(x, y, t)$ – концентрація другого компонента бінарного сплаву у розплаві.

Відомо, що коефіцієнт дифузії сильно залежить від температури і може змінювати значення на порядки. В свою чергу, температуропровідність залежить від хімічного складу сплаву. Але на даному етапі ефектами взаємовпливу краще знехтувати, що значно спрощує математичне формулювання задачі.

Як і в задачі теплопровідності необхідно задати граничні умови, які визначають поведінку системи на границях розрахункової області. На відміну від температурної задачі, де враховується тепловідведення від поверхні, у дифузійній задачі обміну речовиною на границях досліджуваної області немає. Тому граничні умови можна записати у такому вигляді:

$$\frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (9.15)$$

$$\frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (9.16)$$

$$\frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \quad (9.17)$$

$$\frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \quad (9.18)$$

Початкова умова враховує деякий початковий (рівномірний або нерівномірний) розподіл вмісту другого компонента в розплаві:

$$K(x, y, 0) = K_0(x, y). \quad (9.19)$$

Стосовно цієї умови є деякі зауваження. До початку кристалізації середній склад по об'єму розплаву з високою точністю можна вважати сталим. Тобто, поки не відбудеться фазове перетворення (кристалізація) якогось початкового мікрооб'єму, дифузії у рідкій фазі немає. Утворення першої кількості твердої фази призводить до виділення або поглинання другого компонента, змінюється концентрація $K(x, y)$ біля точки фазового перетворення і дифузія відбувається у локальних мікрообластях рідкої фази. В твердій фазі дифузія в ході кристалізації практично не відбувається через значно меншу величину коефіцієнта дифузії.

Таким чином загальна математична постановка задачі для визначення концентрації другого компонента сплаву об'єднує рівняння (9.14) – (9.19):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \\ K(x, y, 0) = K_0(x, y) \\ \frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \end{array} \right. \quad (9.20)$$

Задача (9.20) майже подібна до задачі (9.13), і якщо в останній покласти рівними нулю коефіцієнти тепловідведення $\alpha_1 - \alpha_4$, то (9.13) стане аналогічною до (9.20). Ця обставина спрощує практичну реалізацію розрахунків і алгоритму.

Зважаючи на те, що в імітаційній моделі кристалізації передбачене застосування кліткового автомата, задачі теплопередачі та дифузії зручно розв'язувати чисельно.

Враховуючи необхідність введення системного часу у моделі, порядок розрахунків має бути таким. Перш за все чисельно розв'язується задача (9.13), в якій крок за часом i задає системний час роботи імітаційної моделі. Один крок системного часу є часом розрахунку дифузійної задачі (9.20), на якому в початковій умові кожен раз змінюється $K_0(x, y)$, відповідно до перетворень в локальних областях та за діаграмою стану бінарного сплаву.

Аналіз літературних даних стосовно діаграм стану подвійних сплавів з евтектикою показує, що в багатьох випадках для приблизного математичного опису відповідних ліній можна застосувати лінійну

апроксимацію (Рис. 9.1). В даному випадку зручно застосувати рівняння прямої, яка проходить через дві точки (x_1, y_1) та (x_2, y_2) :

$$\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} \quad (9.21)$$

Для гілок T_{L1} та T_{L2} лінії ліквідус рівняння (6.21) можна подати як:

$$T_{L_{1,2}} = T_{\text{кр}1, \text{кр}2} - (T_{\text{кр}1, \text{кр}2} - T_e) \cdot \frac{C_1}{C_t}, \quad (9.22)$$

де $T_{\text{кр}1}, T_{\text{кр}2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ; T_e – температура кристалізації евтектики; C_l – концентрація компонента B в розплаві; C_e – евтектична концентрація.

Склад твердого розчину при температурі $T(t)$ також можна визначити за допомогою рівняння прямої (9.22). Для α -твердого розчину

$$C_{s1} = C_\alpha \cdot \frac{T_{\text{кр}1} - T(t)}{T_{\text{кр}1} - T_e}, \quad (9.23)$$

та для β -твердого розчину

$$C_{s2} = C_\beta \cdot \frac{T_{\text{кр}2} - T(t)}{T_{\text{кр}2} - T_e}, \quad (9.24)$$

де C_α, C_β – максимальні розчинності в α - і β -твердих розчинах, відповідно, компонентів A і B ; C_{s1} – концентрація компонента B в α -твердому розчині; C_{s2} – концентрація компонента A в β -твердому розчині.

Таким чином, маючи інформацію про характерні точки діаграми стану конкретного подвійного сплаву з евтектикою та знаючи температуру

розплаву в даній точці можна, застосовуючи рівняння (9.22) - (9.24), розрахувати переохолодження в цій точці.

Як показує досвід розрахунків, помилками, які дає лінійна апроксимація, як правило, можна знехтувати. За необхідності підвищення точності можна здійснити апроксимацію другого порядку.

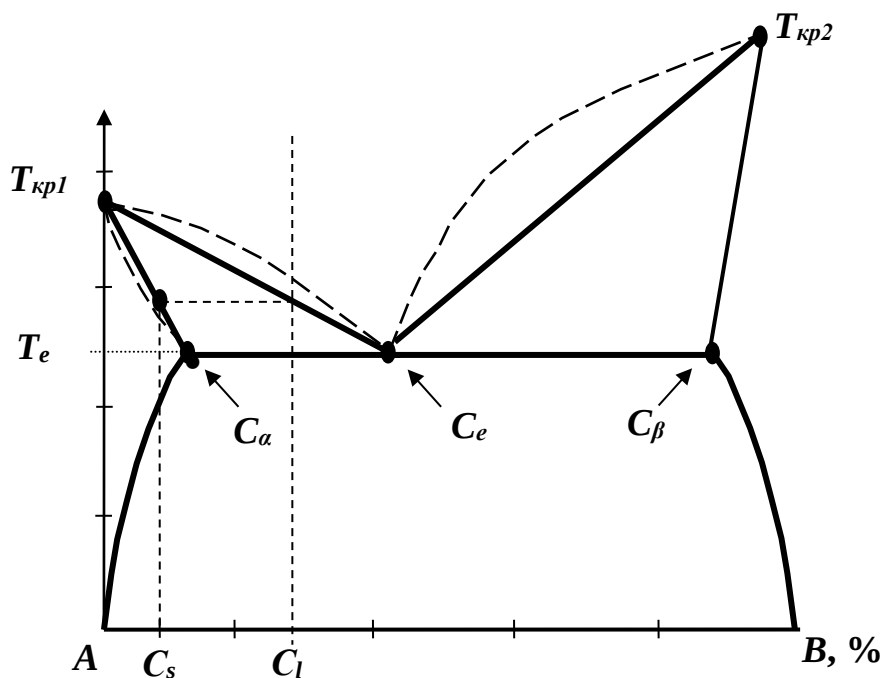


Рис. 9.1. Діаграма стану бінарного сплаву з евтектикою: $T_{кр1}$, $T_{кр2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ; T_e – температура кристалізації евтектики; C_α , C_β – максимальні розчинності в α - і β - твердих розчинах, відповідно, компонентів A і B ; C_e – евтектична концентрація; C_l – концентрація компонента B в розплаві; C_s – концентрація компонента B в твердому розчині

Порядок виконання роботи

За допомогою комп'ютерного експерименту дослідити вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації та структуру сплаву Al-Si.

1. Запустити програму “KRISTAL-2” на виконання та налаштувати імітаційну модель кристалізації бінарних сплавів. Вихідний інтерфейс моделі показано на рисунку 9.2. Він містить п'ять вікон і певну кількість кнопок управління. В лівому верхньому вікні (1 на рисунку 8.1)

моделюється структура твердого металу, у лівому вікні 3 відображається стан системи в даній точці ("рідке - тверде"), а у вікні 4 відображається доєвтектичний або заєвтектичний склад сплаву по площині системи. Праворуч у вікні 2 моделюється крива охолодження. У вікні 5 зображується розподіл другого компонента сплаву по перерізу системи. Призначення кнопок і файлів, в яких зберігається інформація про параметри кристалізації, подібне описаному в комп'ютерному практикумі №6.

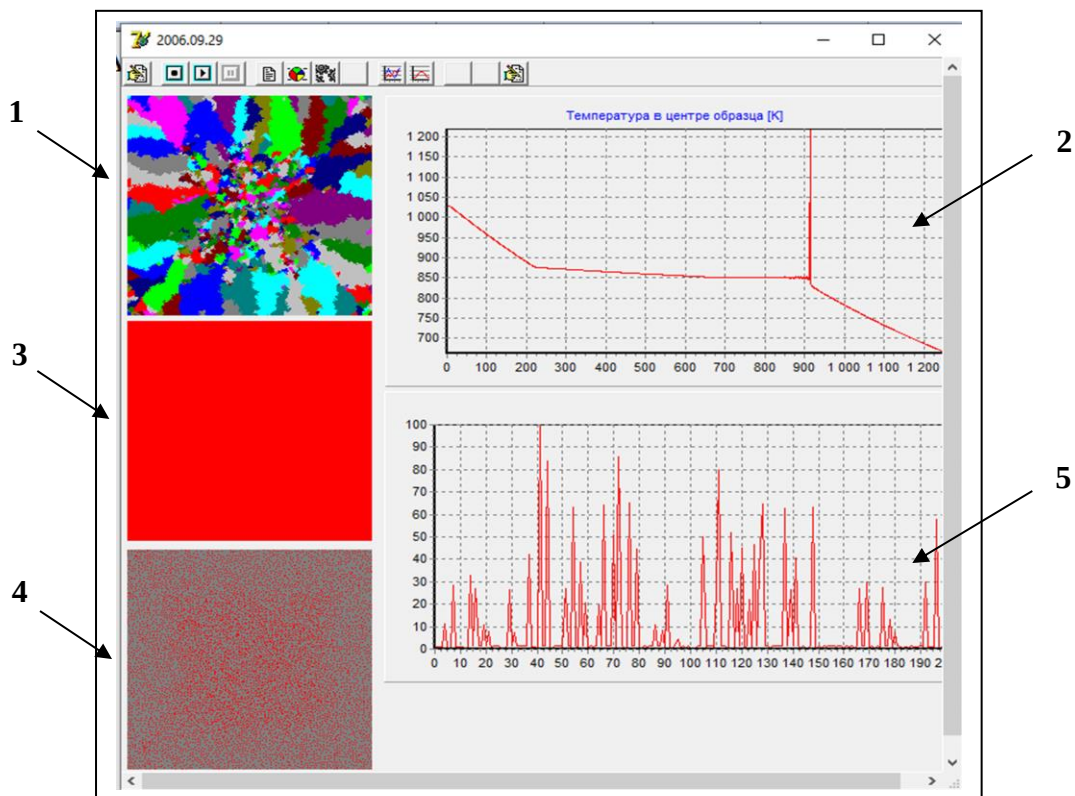


Рис. 9.2. Вихідний інтерфейс імітаційної моделі кристалізації бінарних сплавів: 1 - вікно, в якому відображається формування структури сплаву; 2 - вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження; 3 - вікно, в якому відображається стан системи в даній точці ("рідке - тверде"); 4 - вікно, в якому відображається доєвтектичний або заєвтектичний склад сплаву в даній точці; 5 - вікно, в якому відображається розподіл другого компонента по перерізу системи

2. Налаштувати швидкість охолодження відповідно 1,0; 3,0 та 5,0 °C/с, як описано в комп'ютерному практикумі №7.

3. Провести комп'ютерні експерименти, зберігаючи змодельовані структури та інформацію про параметри кристалізації (файли: "Krv.txt", "SpeedI.txt", "SpeedI_dt.txt", "SpeedV.txt" та "SpeedV_dt.txt").

4. За допомогою комп'ютерної програми "TVGraf" проаналізувати отримані результати і дослідити зміни,.

5. Сформулювати висновки по роботі.

6. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Який фізичний закон лежить в основі математичного формулювання задачі теплопровідності?
2. Який фізичний зміст має функція $F(x,y)$ в правій частині рівняння теплопровідності?
3. Яким методом розв'язуються задачі теплопровідності і дифузії в імітаційній моделі кристалізації сплавів?

КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ УМОВ ОХОЛОДЖЕННЯ ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ НА ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ ТВЕРДОГО МЕТАЛУ

Мета роботи: дослідити можливість впливу на формування структури твердіючого металу за допомогою зміни швидкості охолодження в ході кристалізації із застосуванням комп'ютерної моделі “KRISTAL-1”.

Теоретичні відомості

Відомо що збільшення швидкості охолодження призводить до змін в структурі твердіючого металу. За результатами моделювання в комп'ютерному експерименті з імітаційною моделлю кристалізації чистих металів встановлено, що ці зміни обумовлені зміною кількості центрів кристалізації, які утворюються при наявності переохолодження (комп'ютерний практикум №7 та Рис. 10.1).

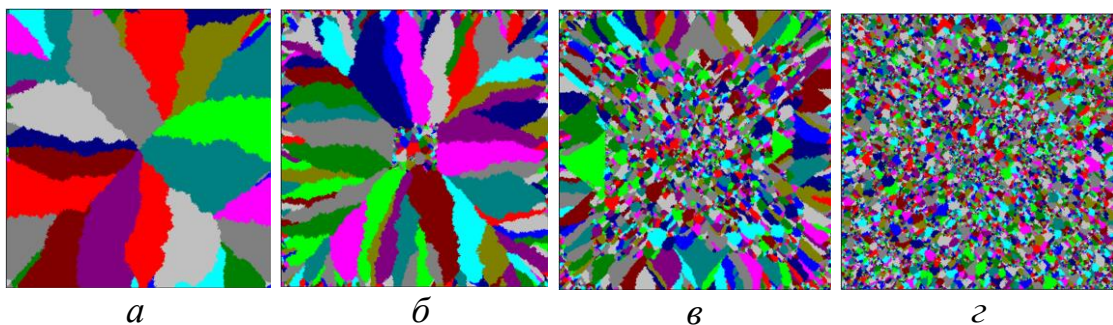


Рис. 10.1. Макроструктури чистого алюмінію, змодельовані при різних швидкостях охолодження $V_{ох}$: $a - 1,7$ град/с; $б - 3,3$ град/с; $в - 5,0$ град/с; $г - 6,7$ град/с

Залежність параметрів кристалізації, теплових ефектів на кривих охолодження від швидкості охолодження можна пояснити процесами, що схематично показані на рис. 10.2.

В випадку повільного охолодження (на рисунку 10.2 позначено 1) кристалізація починається з утворення центрів кристалізації. Центри кристалізації утворюються коли температура металу стане нижчою, ніж температура кристалізації $T_{кр}$ на інтервал метастабільності ΔT_{m2} (лінія Б). При цьому виділяється тепло кристалізації. В даному випадку, швидкість, з якою це тепло виділяється, значно перевищує швидкість тепловідведення. Тому температура системи підвищується до температури, яка нижча за $T_{кр}$ на інтервал метастабільності росту кристалів ΔT_{m1} (його ширина близька до нуля (лінія А)). Нові центри кристалізації не утворюються і відбувається ріст вже наявних кристалів. Після закінчення фазового перетворення метал просто охолоджується і його температура поступово знижується. При більш швидкому охолодженні (на рисунку 10.2 позначений 2) центри кристалізації починають утворюватися після досягнення лінії Б. Але, через достатньо швидке охолодження, температура у всієї системи або в окремих її частинах знову понижується до лінії Б і створюються умови для утворення нових зародків твердої фази. Їх виникнення зменшує величину переохолодження і продовжується зростання вже існуючих кристалів. Такі процеси можуть відбуватися або один, або декілька разів, після чого кристалізація закінчується і метал просто охолоджується.

Коли система охолоджується з високою швидкістю і досягає лінії Б також починається кристалізація. Але, швидке тепловідведення не дає температурі металу підвищуватись і вона залишається на рівні лінії Б. Створюються умови одночасного утворення центрів кристалізації і їх росту. По закінченні процесу кристалізації метал охолоджується.

Утворенням зародків в кілька етапів можна пояснити утворення класичної тризонної структури виливка (Рис. 10.3). Центри кристалізації з'являються на двох етапах: на початку кристалізації та на стадії, що відповідає формуванню центральної зони рівновісних кристалів.

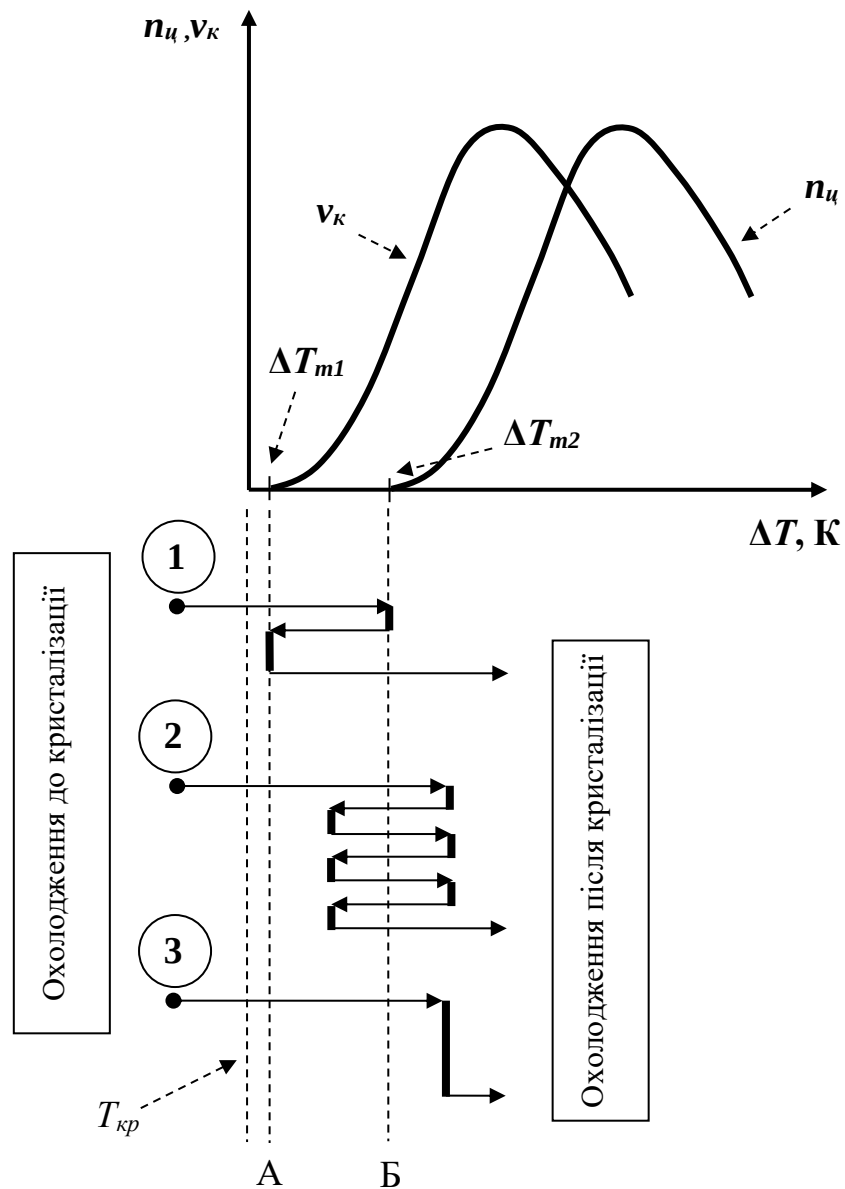


Рис. 10.2. Схематичне зображення гомогенного утворення центрів кристалізації і їх росту при різних швидкостях охолодження. ΔT – переохолодження; n_u – швидкість утворення центрів кристалізації; v_k – лінійна швидкість росту кристалу; ΔT_{m1} – інтервал метастабільності для швидкості росту кристалу; ΔT_{m2} – інтервал метастабільності для швидкості утворення центрів кристалізації; $T_{кр}$ – теоретична температура кристалізації; А, Б – умовні лінії температури металу. 1 – "низька" швидкість охолодження; 2 – "середня" швидкість охолодження; 3 – "висока" швидкість охолодження

Застосування клітинних автоматів значно спрощує математичні розрахунки та надає принципову можливість моделювання нової полікристалічної структури металевих матеріалів. Вплив зовнішніх умов охолодження досліджуваної системи (розплаву) на функціонування

клітинного автомата дає змогу встановити технологічні методи отримання різних структур металу в твердому стані. Для демонстрації можливостей імітаційної моделі в комп'ютерному експерименті гомогенної кристалізації алюмінію за допомогою варіювання швидкості охолодження отримані модельні структури, наведені на рисунку 10.4 та 10.5.

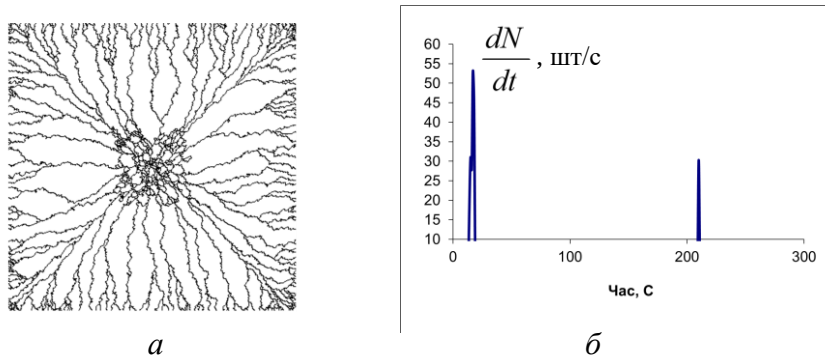


Рис. 10.3. Змодельована тризонна структура алюмінію (а) та залежність швидкості утворення центрів кристалізації від часу (б) в обчислювальному експерименті з імітаційною моделлю

На рисунку 10.4 показана структура алюмінію, отримана за допомогою багаторазової зміни інтенсивності відведення тепла. Спочатку дрібні зерна формувались на межах системи в умовах високої швидкості охолодження. Потім інтенсивність відведення тепла з усіх боків симетрично зменшувалася, а розмір зростаючих зерен збільшувався. Через деякий час швидкість охолодження збільшувалася, потім - зменшувалася, а потім – знову збільшувалася. В результаті кінцева структура складається з кількох ділянок з різними формою та середнім розміром зерен (рисунку 10.4).

За допомогою підбору параметрів моделі отримана складна алюмінієва структура, в якій наявні зерна різної форми, розмірів та орієнтації (рис. 10.5). Така структура алюмінію є результатом зміни швидкості охолодження та асиметричності величин коефіцієнтів відведення тепла з різних сторін, значення яких також змінювали в ході експерименту.

Такі режими кристалізації складно реалізувати на практиці, але ці експерименти демонструють можливості зазначеної моделі. Імітаційна

модель кристалізації дає змогу візуалізувати утворення макроструктури металів за різних умов кристалізації. А це, в свою чергу, дає змогу в рамках комп'ютерного експерименту розробити методи управління процесом кристалізації для отримання необхідних властивостей литих виробів.

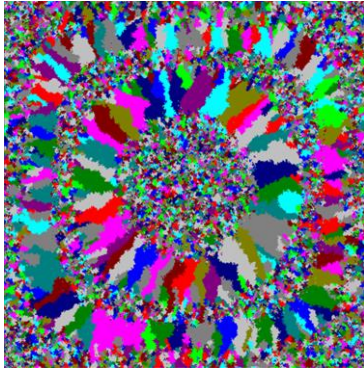


Рис. 10.4. Макроструктура чистого алюмінію, змодельована черговою зміною коефіцієнтів тепловіддачі в процесі кристалізації

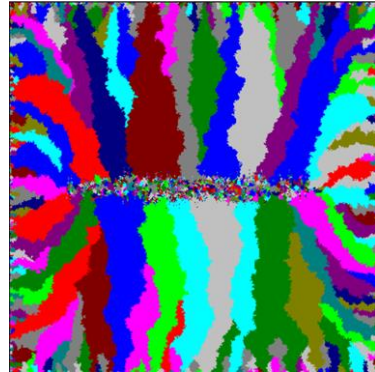


Рис. 10.5. Макроструктура з чистого алюмінію, яка змодельована асиметричними варіаціями коефіцієнтів теплопередачі

Порядок виконання роботи

За допомогою комп'ютерного експерименту дослідити вплив зміни швидкості охолодження при кристалізації на структуру твердого металу в ході гомогенної кристалізації. Для проведення досліджень потрібно:

1. Запустити програму “KRISTAL-1” на виконання налаштувати імітаційну модель кристалізації чистих металів, як зазначено у комп'ютерному практикумі №6.

2. Задати довільну величину швидкості охолодження за допомогою коригування коефіцієнтів тепловіддачі. Їх величини можуть бути як однаковими з усіх боків, так і різними.

3. Розпочати комп'ютерний експеримент. Зупинити роботу програми (натисканням кнопки 9, Рис. 6.4). При цьому можна змінити деякі параметри в меню налаштування і продовжити роботу повторним натисканням кнопки 8 (параметри, які можна корегувати виглядають більш контрастно). Ці дії можна повторювати декілька разів.

4. Повторити пункти 2 та 3, встановлюючи різні початкові параметри моделі.
5. Проаналізувати отримані результати.
6. Сформулювати висновки по роботі.
7. Оформити звіт.

Контрольні запитання

1. Яким чином величина швидкості охолодження впливає на формування структури твердого металу?
2. Яким чином можна пояснити формування тризонної структури твердого металу?
3. Яким чином можна впливати на формування структури твердого металу під в ході кристалізації?

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. В.П. Железний. Експериментальна теплофізика. Методи дослідження речовин. Київ: Фенікс, 2016. 320 с.
2. Ерік Маттес. Пришвидшений курс Python. Практичний, проєктно-орієнтований вступ до програмування. Київ: Старого Лева, 2021. 600 с.
3. Л.О. Волонтир, Л.В.Зелінська, Н.А. Потапова, І.А. Чіков. Чисельні методи. Вінниця: ВНАУ, 2020. 322 с.
4. Горват А.А. , Молнар О.О., Мінькович В.В. Методи обробки експериментальних даних з використанням MS Excel: Навчальний посібник. Ужгород: Видавництво УжНУ “Говерла”, 2019. – 182 с
5. Г.О. Статюха, Д.М. Складанний, О.С. Бонаренко. Вступ до планування оптимального експерименту: Навч. посібн. для студ. спец. 092502 – Комп’ютерно-інтегровані технологічні процеси і виробництва / Уклад.: – К.: ІВЦ «Політехніка», 2011. – 117 с
6. Теслюк В.М., Загарюк Р.В. Методи багатокритеріальної оптимізації: Ч.1. Конспект лекцій з курсу «Методи багатокритеріальної оптимізації» для студентів спеціальності 8.05010103 Системне проектування». Львів: Видавництво Національного університету Львівська політехніка, 2012. 64 с.
7. В. Б. Неруш, В. В. Курдеча. Імітаційне моделювання систем та процесів: Електронне навчальне видання. Конспект лекцій / К.: НН ІТС НТУУ «КПІ», 2012. – 115 с
8. О. Donii. Modeling of metal crystallization by means of cellular automation // Materials science. Non-equilibrium phase transformations. – 4. - 2017. – P. 150 – 153.

ДОДАТОК А

Таблиці з номерами індивідуальних завдань та вихідні дані для
розрахунків в комп'ютерних практикумах №1 та №2

Таблиця А.1. Номери індивідуальних завдань та параметри для розрахунку тривалості
нагрівання металевої заготовки (комп'ютерні практикуми №1 та №2)

№ варіанту	Метал	Геометрія зразка						T_f , [C]	T_0 , [C]	α , [Вт·/(м ² ·К)]	ΔT , %
		a , см	b , см	h , см	r , см	l , см	D , см				
1	Cu	10	10	10	-	-	-	600	20	200	1,0
2	Cu	1	5	10	-	-	-	550	18	50	1,5
3	Cu	10	3	8	-	-	-	700	20	130	5,0
4	Cu	-	-	-	10	10	-	500	25	60	3,0
5	Cu	-	-	-	3	100	-	700	18	90	2,0
6	Cu	-	-	-	10	5	-	670	25	100	1,5
7	Cu	-	-	-	-	-	20	720	20	70	2,0
8	Cu	-	-	-	-	-	7	620	18	90	3,0
9	Cu	-	-	-	-	-	14	620	20	30	5,5
10	Al	8	9	10	-	-	-	500	25	100	2,0
11	Al	11	5	10	-	-	-	650	18	65	3,5
12	Al	10	3	2	-	-	-	540	18	75	4,0
13	Al	-	-	-	9	30	-	700	20	80	5,0
14	Al	-	-	-	3	10	-	500	20	90	3,0
15	Al	-	-	-	3	5	-	640	18	120	1,0
16	Al	-	-	-	-	-	16	550	25	90	2,5
17	Al	-	-	-	-	-	10	650	20	80	3,0
18	Al	-	-	-	-	-	30	620	18	95	4,0
19	Cu	1	10	10	-	-	-	600	25	110	1,0
20	Cu	10	5	10	-	-	-	620	18	150	5,0
21	Cu	8	9	5	-	-	-	580	20	50	3,5
22	Al	-	-	-	4	20	-	680	25	60	2,5
23	Al	-	-	-	-	-	11	710	18	80	3,5
24	Al	4	11	3	-	-	-	625	20	70	1,5
25	Al	-	-	-	1	50	-	725	20	100	3,0

Таблиця А.2. Залежність питомої теплоємності Al та Cu від температури
(комп'ютерний практикум №1)

$c, [\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})]$		
$T,$ [K]	Al ($\rho = 2,700$ г/см ³)	Cu ($\rho = 8,873$ г/см ³)
300	904	385
800	1154	442

Таблиця А.3. Формули розрахунку площі поверхні і об'єму основних
геометричних фігур

	“Плита”	“Циліндр”	“Куля”
Площа поверхні	$S = 2(l_1 \cdot l_2 + l_2 \cdot l_3 + l_1 \cdot l_3)$	$S = 2\pi \cdot r \cdot l + 2\pi \cdot r^2$	$S = 4\pi \cdot r^2$
Об'єм	$V = l_1 \cdot l_2 \cdot l_3$	$V = \pi \cdot r^2 \cdot l$	$V = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3$

ДОДАТОК Б

Варіанти завдань для розрахунків в комп'ютерному практикумі №3

Таблиця Б.1. Варіант № 1

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	Y
1	46,5	5	31	7,5	7,5	70,6
2	43,5	5	29	12,5	7,5	68,0
3	43,5	5	29	7,5	7,5	68,6
4	40,5	5	27	12,5	7,5	95,3
5	43,5	5	29	7,5	12,5	94,3
6	40,5	5	27	12,5	12,5	118,6
7	40,5	5	27	7,5	12,5	100,3
8	37,5	5	25	12,5	12,5	111,3
9	42	28	10	10	10	92,0
10	45	30	10	10	5	84,3
11	39	26	10	10	15	105,0
12	45	30	10	5	10	80,0
13	39	26	10	15	10	105,3
14	45	30	5	10	10	94,3
15	45	30	15	10	10	86,6

Таблиця Б.2. Варіант № 2

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	Y
1	46,5	31	7,5	7,5	7,5	10,04
2	43,5	29	12,5	7,5	7,5	9,44
3	43,5	29	7,5	12,5	7,5	7,22
4	40,5	27	12,5	12,5	7,5	11,60
5	43,5	29	7,5	7,5	12,5	9,94
6	40,5	27	12,5	7,5	12,5	10,69
7	40,5	27	7,5	12,5	12,5	11,39
8	37,5	25	12,5	12,5	12,5	8,35
9	42	28	10	10	10	10,27
10	45	30	10	10	5	8,58
11	39	26	10	10	15	9,58
12	45	30	10	5	10	9,10
13	39	26	10	15	10	10,23
14	45	30	5	10	10	9,89
15	45	30	15	10	10	10,91

Таблиця Б.3. Варіант № 3

№	X₁	X₂	X₃	X₄	Y
1	7	1,5	0	0,45	17
2	7,4	3,4	0	0,44	18,5
3	7,1	2,5	0,3	0,4	18,7
4	12	1,5	0	0,58	17,2
5	11,8	3,5	0	0,55	18,5
6	11,5	3,5	0,4	0,5	19,1
7	11,5	3	0,6	0,5	20
8	9,2	1,8	0	0,48	17,8
9	9,5	4,2	0,25	0,5	18,5
10	5,9	4,9	0,6	0,66	18,9
11	6,2	2	,02	0,3	21,0

Таблиця Б.4. Варіант № 4

№	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	Y
1	46,5	31	7,5	7,5	7,5	10,04
2	43,5	29	12,5	7,5	7,5	9,44
3	43,5	29	7,5	12,5	7,5	7,22
4	40,5	27	12,5	12,5	7,5	11,60
5	43,5	29	7,5	7,5	12,5	9,94
6	40,5	27	12,5	7,5	12,5	10,69
7	40,5	27	7,5	12,5	12,5	11,39
8	37,5	25	12,5	12,5	12,5	8,35
9	42	28	10	10	10	10,27
10	45	30	10	10	5	8,58
11	39	26	10	10	15	9,58
12	45	30	10	5	10	9,10
13	39	26	10	15	10	10,23
14	45	30	5	10	10	9,89
15	45	30	15	10	10	10,91

Таблиця Б.5. Варіант № 5

№	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	X₆	Y
1	0,21	0,79	0,2	0,65	1,65	0,07	9,7
2	0,2	1,1	0,8	0,74	1,51	0,12	9,1
3	0,19	0,65	1,05	0,87	1,89	0,06	8,8
4	0,26	0,55	0,39	0,68	1,48	0,15	7,9
5	0,30	0,59	0,45	0,82	1,18	0,03	7,4
6	0,18	0,64	0,61	0,91	1,2	0,09	8,1
7	0,2	0,6	0,63	1,05	1,18	0	3,6
8	0,21	0,58	0,81	0,73	1,54	0,04	9
9	0,25	0,55	0,76	0,92	1,36	0,14	5,5
10	0,19	1,05	0,44	1,22	1	0	6,3

Продовження табл. Б.5.

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
11	0,18	0,92	0,32	0,59	1,25	0,07	8,4
12	0,23	0,64	0,28	0,63	1,32	0,06	7,5
13	0,26	0,78	0,41	0,74	1,1	0,11	8,8
14	0,19	0,82	0,54	0,81	1,05	0,03	6,2
15	0,29	0,90	1,1	0,57	1,48	0	5,8
16	0,30	0,69	0,79	0,61	1,54	0,02	10,1
17	0,24	0,76	0,36	1,25	1,63	0,01	7,7
18	0,17	0,67	0,43	0,74	1,63	0,12	6,4
19	0,19	0,99	0,34	0,87	1,41	0	8,1
20	0, 25	0,81	0,87	0,78	1,05	0,14	9

Таблиця Б.6. Варіант № 6

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	7	1,5	0	0,45	4
2	7,4	3,4	0	0,44	3,2
3	7,1	2,5	0,3	0,4	2
4	12	1,5	0	0,58	1,5
5	11,8	3,5	0	0,55	0,8
6	11,5	3,5	0,4	0,5	1
7	11,5	3	0,6	0,5	1,2
8	9,2	1,8	0	0,48	1,5
9	9,5	4,2	0,25	0,5	1,6
10	5,9	4,9	0,6	0,66	1,7
11	6,2	2	,02	0,3	2,8

Таблиця Б.7. Варіант № 7

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
1	0,21	0,79	0,2	0,65	1,65	0,07	70
2	0,2	1,1	0,8	0,74	1,51	0,12	73
3	0,19	0,65	1,05	0,87	1,89	0,06	73
4	0,26	0,55	0,39	0,68	1,48	0,15	78
5	0,30	0,59	0,45	0,82	1,18	0,03	80
6	0,18	0,64	0,61	0,91	1,2	0,09	77
7	0,2	0,6	0,63	1,05	1,18	0	85
8	0,21	0,58	0,81	0,73	1,54	0,04	73
9	0,25	0,55	0,76	0,92	1,36	0,14	90
10	0,19	1,05	0,44	1,22	1	0	88
11	0,18	0,92	0,32	0,59	1,25	0,07	76
12	0,23	0,64	0,28	0,63	1,32	0,06	80
13	0,26	0,78	0,41	0,74	1,1	0,11	74
14	0,19	0,82	0,54	0,81	1,05	0,03	88

Продовження табл. Б.7.

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
15	0,29	0,90	1,1	0,57	1,48	0	87
16	0,30	0,69	0,79	0,61	1,54	0,02	65
17	0,24	0,76	0,36	1,25	1,63	0,01	79
18	0,17	0,67	0,43	0,74	1,63	0,12	86
19	0,19	0,99	0,34	0,87	1,41	0	77
20	0, 25	0,81	0,87	0,78	1,05	0,14	72

Таблиця Б.8. Варіант № 8

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	7	6	6	30	1,05
2	7	6	6	90	1,1
3	7	6	2	30	0,9
4	7	6	2	90	0,85
5	7	2	6	30	1,32
6	7	2	6	90	0,84
7	7	2	2	30	0,86
8	7	2	2	90	0,75
9	17	6	6	30	1,2
10	17	6	6	90	1,11
11	17	6	2	30	0,98
12	17	6	2	90	0,97
13	17	2	6	30	1,3
14	17	2	6	90	1
15	17	2	2	30	0,89
16	17	2	2	90	0,91

Таблиця Б.9. Варіант № 9

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	64	4	0	8	1150
2	64,5	4	0	7,5	1050
3	66,5	4	0	7,5	1100
4	53,4	4,6	13	0	864
5	53	7	5	0	530
6	51	9	8	0	814
7	79	15	2	0	725
8	79	0	2	15	990
9	79	13	0	0	763
10	74	13	0	0	870
11	69	13	0	0	698

Таблиця Б.10. Варіант № 10

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	64	4	0	8	1150
2	64,5	4	0	7,5	1050
3	66,5	4	0	7,5	1100
4	53,4	4,6	13	0	864
5	53	7	5	0	530
6	51	9	8	0	814
7	79	15	2	0	725
8	79	0	2	15	990
9	79	13	0	0	763
10	74	13	0	0	870
11	69	13	0	0	698

Таблиця Б.11. Варіант № 11

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	7	6	6	30	1,05
2	7	6	6	90	1,1
3	7	6	2	30	0,9
4	7	6	2	90	0,85
5	7	2	6	30	1,32
6	7	2	6	90	0,84
7	7	2	2	30	0,86
8	7	2	2	90	0,75
9	17	6	6	30	1,2
10	17	6	6	90	1,11
11	17	6	2	30	0,98
12	17	6	2	90	0,97
13	17	2	6	30	1,3
14	17	2	6	90	1
15	17	2	2	30	0,89
16	17	2	2	90	0,91

Таблиця Б.12. Варіант № 12

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
1	0,21	0,79	0,2	0,65	1,65	0,07	70
2	0,2	1,1	0,8	0,74	1,51	0,12	73
3	0,19	0,65	1,05	0,87	1,89	0,06	73
4	0,26	0,55	0,39	0,68	1,48	0,15	78
5	0,30	0,59	0,45	0,82	1,18	0,03	80
6	0,18	0,64	0,61	0,91	1,2	0,09	77
7	0,2	0,6	0,63	1,05	1,18	0	85
8	0,21	0,58	0,81	0,73	1,54	0,04	73
9	0,25	0,55	0,76	0,92	1,36	0,14	90

Продовження табл. Б.12.

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
10	0,19	1,05	0,44	1,22	1	0	88
11	0,18	0,92	0,32	0,59	1,25	0,07	76
12	0,23	0,64	0,28	0,63	1,32	0,06	80
13	0,26	0,78	0,41	0,74	1,1	0,11	74
14	0,19	0,82	0,54	0,81	1,05	0,03	88
15	0,29	0,90	1,1	0,57	1,48	0	87
16	0,30	0,69	0,79	0,61	1,54	0,02	65
17	0,24	0,76	0,36	1,25	1,63	0,01	79
18	0,17	0,67	0,43	0,74	1,63	0,12	86
19	0,19	0,99	0,34	0,87	1,41	0	77

Таблиця Б.13. Варіант № 13

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	7	1,5	0	0,45	4
2	7,4	3,4	0	0,44	3,2
3	7,1	2,5	0,3	0,4	2
4	12	1,5	0	0,58	1,5
5	11,8	3,5	0	0,55	0,8
6	11,5	3,5	0,4	0,5	1
7	11,5	3	0,6	0,5	1,2
8	9,2	1,8	0	0,48	1,5
9	9,5	4,2	0,25	0,5	1,6
10	5,9	4,9	0,6	0,66	1,7
11	6,2	2	,02	0,3	2,8

Таблиця Б.14. Варіант № 14

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	Y
1	46,5	31	7,5	7,5	7,5	10,04
2	43,5	29	12,5	7,5	7,5	9,44
3	43,5	29	7,5	12,5	7,5	7,22
4	40,5	27	12,5	12,5	7,5	11,60
5	43,5	29	7,5	7,5	12,5	9,94
6	40,5	27	12,5	7,5	12,5	10,69
7	40,5	27	7,5	12,5	12,5	11,39
8	37,5	25	12,5	12,5	12,5	8,35
9	42	28	10	10	10	10,27
10	45	30	10	10	5	8,58
11	39	26	10	10	15	9,58
12	45	30	10	5	10	9,10
13	39	26	10	15	10	10,23
14	45	30	5	10	10	9,89
15	45	30	15	10	10	10,91

Таблиця Б.15. Варіант № 15

№	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	X₆	Y
1	0,21	0,79	0,2	0,65	1,65	0,07	9,7
2	0,2	1,1	0,8	0,74	1,51	0,12	9,1
3	0,19	0,65	1,05	0,87	1,89	0,06	8,8
4	0,26	0,55	0,39	0,68	1,48	0,15	7,9
5	0,30	0,59	0,45	0,82	1,18	0,03	7,4
6	0,18	0,64	0,61	0,91	1,2	0,09	8,1
7	0,2	0,6	0,63	1,05	1,18	0	3,6
8	0,21	0,58	0,81	0,73	1,54	0,04	9
9	0,25	0,55	0,76	0,92	1,36	0,14	5,5
10	0,19	1,05	0,44	1,22	1	0	6,3
11	0,18	0,92	0,32	0,59	1,25	0,07	8,4
12	0,23	0,64	0,28	0,63	1,32	0,06	7,5
13	0,26	0,78	0,41	0,74	1,1	0,11	8,8
14	0,19	0,82	0,54	0,81	1,05	0,03	6,2
15	0,29	0,90	1,1	0,57	1,48	0	5,8
16	0,30	0,69	0,79	0,61	1,54	0,02	10,1
17	0,24	0,76	0,36	1,25	1,63	0,01	7,7
18	0,17	0,67	0,43	0,74	1,63	0,12	6,4
19	0,19	0,99	0,34	0,87	1,41	0	8,1
20	0, 25	0,81	0,87	0,78	1,05	0,14	9

Таблиця Б.16. Варіант № 16

№	X₁	X₂	X₃	X₄	X₅	Y
1	46,5	31	7,5	7,5	7,5	10,04
2	43,5	29	12,5	7,5	7,5	9,44
3	43,5	29	7,5	12,5	7,5	7,22
4	40,5	27	12,5	12,5	7,5	11,60
5	43,5	29	7,5	7,5	12,5	9,94
6	40,5	27	12,5	7,5	12,5	10,69
7	40,5	27	7,5	12,5	12,5	11,39
8	37,5	25	12,5	12,5	12,5	8,35
9	42	28	10	10	10	10,27
10	45	30	10	10	5	8,58
11	39	26	10	10	15	9,58
12	45	30	10	5	10	9,10
13	39	26	10	15	10	10,23
14	45	30	5	10	10	9,89
15	45	30	15	10	10	10,91

Таблиця Б.17. Варіант № 17

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	Y
1	7	1,5	0	0,45	17
2	7,4	3,4	0	0,44	18,5
3	7,1	2,5	0,3	0,4	18,7
4	12	1,5	0	0,58	17,2
5	11,8	3,5	0	0,55	18,5
6	11,5	3,5	0,4	0,5	19,1
7	11,5	3	0,6	0,5	20
8	9,2	1,8	0	0,48	17,8
9	9,5	4,2	0,25	0,5	18,5
10	5,9	4,9	0,6	0,66	18,9
11	6,2	2	,02	0,3	21,0

Таблиця Б.18. Варіант № 18

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	Y
1	46,5	5	31	7,5	7,5	70,6
2	43,5	5	29	12,5	7,5	68,0
3	43,5	5	29	7,5	7,5	68,6
4	40,5	5	27	12,5	7,5	95,3
5	43,5	5	29	7,5	12,5	94,3
6	40,5	5	27	12,5	12,5	118,6
7	40,5	5	27	7,5	12,5	100,3
8	37,5	5	25	12,5	12,5	111,3
9	42	28	10	10	10	92,0
10	45	30	10	10	5	84,3
11	39	26	10	10	15	105,0
12	45	30	10	5	10	80,0
13	39	26	10	15	10	105,3
14	45	30	5	10	10	94,3
15	45	30	15	10	10	86,6

Таблиця Б.19. Варіант № 19

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
1	0,21	0,79	0,2	0,65	1,65	0,07	70
2	0,2	1,1	0,8	0,74	1,51	0,12	73
3	0,19	0,65	1,05	0,87	1,89	0,06	73
4	0,26	0,55	0,39	0,68	1,48	0,15	78
5	0,30	0,59	0,45	0,82	1,18	0,03	80
6	0,18	0,64	0,61	0,91	1,2	0,09	77
7	0,2	0,6	0,63	1,05	1,18	0	85
8	0,21	0,58	0,81	0,73	1,54	0,04	73
9	0,25	0,55	0,76	0,92	1,36	0,14	90
10	0,19	1,05	0,44	1,22	1	0	88

Продовження табл. Б.19.

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	X ₆	Y
11	0,18	0,92	0,32	0,59	1,25	0,07	76
12	0,23	0,64	0,28	0,63	1,32	0,06	80
13	0,26	0,78	0,41	0,74	1,1	0,11	74
14	0,19	0,82	0,54	0,81	1,05	0,03	88
15	0,29	0,90	1,1	0,57	1,48	0	87
16	0,30	0,69	0,79	0,61	1,54	0,02	65
17	0,24	0,76	0,36	1,25	1,63	0,01	79
18	0,17	0,67	0,43	0,74	1,63	0,12	86
19	0,19	0,99	0,34	0,87	1,41	0	77
20	0, 25	0,81	0,87	0,78	1,05	0,14	72

Таблиця Б.20. Варіант № 20

№	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅	Y
1	46,5	31	7,5	7,5	7,5	10,04
2	43,5	29	12,5	7,5	7,5	9,44
3	43,5	29	7,5	12,5	7,5	7,22
4	40,5	27	12,5	12,5	7,5	11,60
5	43,5	29	7,5	7,5	12,5	9,94
6	40,5	27	12,5	7,5	12,5	10,69
7	40,5	27	7,5	12,5	12,5	11,39
8	37,5	25	12,5	12,5	12,5	8,35
9	42	28	10	10	10	10,27
10	45	30	10	10	5	8,58
11	39	26	10	10	15	9,58
12	45	30	10	5	10	9,10
13	39	26	10	15	10	10,23
14	45	30	5	10	10	9,89
15	45	30	15	10	10	10,91

ДОДАТОК В

Варіанти завдань для розрахунків в комп'ютерному практикумі №4

Таблиця В.1. Вплив складу сплаву Al-Mg-Zn та його властивості (відношення $\frac{\sigma_{0,2}}{\sigma_B}$ і відносного видовження $\delta \geq 20$)

Сплав	План-матриця, %			Варіанти завдань								
	Zn	Mg	Zn+Mg	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	7	1	8	0,75	14	0,71	0,73	14	0,75	0,73	14	14
2	5,5	2,5	8	0,69	18	0,69	0,69	17	0,69	0,71	15	17
3	4	4	8	0,58	22	0,59	0,58	20	0,55	0,58	20	20
4	2,5	5,5	8	0,47	24	0,42	0,47	24	0,47	0,47	24	24
5	1	7	8	0,48	23	0,48	0,48	23	0,48	0,38	23	23
6	1	5,5	6,5	0,46	25	0,46	0,46	25	0,46	0,46	25	25
7	1	4	5	0,45	32	0,45	0,45	27	0,40	0,45	27	27
8	1	2,5	3,5	0,49	30	0,49	0,49	30	0,49	0,45	31	30
9	1	1	2	0,57	30	0,60	0,57	34	0,57	0,57	34	34
10	2,5	1	3,5	0,58	23	0,58	0,58	23	0,58	0,58	23	23
11	4	1	5	0,61	17	0,61	0,61	17	0,61	0,63	15	17
12	5,5	1	6,5	0,67	16	0,67	0,67	16	0,67	0,67	16	16
13	4	2,5	6,5	0,59	20	0,59	0,59	18	0,59	0,59	18	18
14	2,5	4	6,5	0,47	11	0,47	0,47	25	0,47	0,45	25	25
15	2,5	2,5	5	0,52	23	0,52	0,52	23	0,57	0,52	20	23

Таблиця В.2. Вплив складу сплаву Al-Mg-Zn та його властивості

Сплав	План-матриця, %			Варіанти завдань								
	Zn	Mg	Zn+Mg	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	7	1	8	0,73	14	0,74	15	0,73	14	0,79	12	14
2	5,5	2,5	8	0,69	17	0,69	17	0,69	17	0,69	17	17
3	4	4	8	0,58	20	0,58	21	0,58	20	0,58	20	20
4	2,5	5,5	8	0,47	24	0,47	24	0,47	24	0,47	27	24
5	1	7	8	0,48	23	0,47	23	0,48	23	0,48	23	23
6	1	5,5	6,5	0,46	25	0,40	25	0,46	25	0,44	25	25

Продовження табл. В.2.

Сплав	План-матриця, %			Варіанти завдань								
	Zn	Mg	Zn+Mg	10	11	12	13	14	15	16	17	18
7	1	4	5	0,45	27	0,46	27	0,45	27	0,45	27	27
8	1	2,5	3,5	0,49	30	0,49	30	0,49	30	0,49	29	30
9	1	1	2	0,57	34	0,57	34	0,57	34	0,57	37	34
10	2,5	1	3,5	0,58	23	0,58	23	0,58	23	0,60	23	23
11	4	1	5	0,61	17	0,61	17	0,61	17	0,61	18	17
12	5,5	1	6,5	0,67	16	0,66	16	0,67	16	0,67	14	16
13	4	2,5	6,5	0,59	18	0,59	19	0,59	18	0,59	18	18
14	2,5	4	6,5	0,47	25	0,47	24	0,47	25	0,47	25	25
15	2,5	2,5	5	0,52	23	0,52	23	0,52	23	0,52	20	23

ДОДАТОК Г

Варіанти завдань для розрахунків в комп'ютерному практикумі №5

Варіант №1

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_b і відносного видовження δ :

$$G_b = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_b і відносного видовження $\delta \geq 18$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$650 \leq G_b \leq 720$$

$$14 \leq \delta \leq 20$$

Таблиця Г.1. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_b, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	685	687	21	20,5	20,5
2	0,30	500	640	639	643	23	22,5	23,5
3	0,30	600	590	590	590	25	25	24
4	0,35	400	780	781	785	15	14,5	15
5	0,35	500	700	696	705	19	19	19
6	0,35	600	660	658	660	22	21,5	22
7	0,40	400	860	865	860	12	12,5	12,5
8	0,40	500	760	753	761	16	16,5	16,5
9	0,40	600	650	665	670	19	19,5	18,5

Варіант №2

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного звуження ϕ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\phi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного звуження $\phi \geq 65$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$420 \leq G_T \leq 500$$

$$67 \leq \phi \leq 73$$

Таблиця Г.2. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\phi, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	540	545	66	65	64
2	0,30	500	490	490	490	71	70	73
3	0,30	600	400	400	400	78	77	75
4	0,35	400	630	630	635	61	60	59
5	0,35	500	540	545	543	67	67	67
6	0,35	600	420	421	420	74	73	73
7	0,40	400	700	705	700	58	59	59
8	0,40	500	590	587	590	65	66	67
9	0,40	600	450	455	450	71	72	71

Варіант №3

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі значень межі текучості G_T та ударної в'язкості a_H :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T та ударної в'язкості $a_H \geq 250$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$670 \leq G_T \leq 700$$

$$220 \leq a_H \leq 230$$

Таблиця Г.3. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_b, \text{МПа}$			$a_H, \text{Дж/см}^2$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	545	555	220	215	220
2	0,30	500	490	485	490	240	245	240
3	0,30	600	400	410	400	270	270	275
4	0,35	400	630	625	625	150	145	155
5	0,35	500	540	540	545	190	195	185
6	0,35	600	420	418	421	230	225	230
7	0,40	400	700	703	705	100	100	100
8	0,40	500	590	595	595	160	165	170
9	0,40	600	450	445	450	200	205	205

Варіант №4

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і ударної в'язкості a_H :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $a_H \geq 210$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$800 \leq G_B \leq 820$$

$$210 \leq a_H \leq 220$$

Таблиця Г.4. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	G_B , МПа			a_H , Дж/см ²		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	690	690	220	215	220
2	0,30	500	640	643	640	240	240	235
3	0,30	600	590	591	590	270	275	265
4	0,35	400	780	780	780	150	150	155
5	0,35	500	700	700	700	190	195	195
6	0,35	600	660	660	665	230	235	235
7	0,40	400	860	861	858	100	105	105
8	0,40	500	760	760	760	160	160	160
9	0,40	600	660	658	662	200	200	205

Варіант №5

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного видовження δ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного видовження $\delta \geq 18$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$650 \leq G_T \leq 690$$

$$18 \leq \delta \leq 20$$

Таблиця Г.5. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	545	555	21	20.5	20.5
2	0,30	500	490	485	495	23	22.5	23.5
3	0,30	600	400	405	410	25	25.5	24.5
4	0,35	400	630	635	632	15	14.5	15.5
5	0,35	500	540	535	545	19	18.5	19.5
6	0,35	600	420	418	421	22	21.5	22.5
7	0,40	400	700	703	705	12	12.5	12
8	0,40	500	590	585	595	16	16	16
9	0,40	600	450	455	457	19	19.5	18.5

Варіант №6

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і відносного видовження δ :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $\delta \geq 23$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$640 \leq G_B \leq 700$$

$$11 \leq \delta \leq 19$$

Таблиця Г.6. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_B, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	680	687	21	21,5	20,5
2	0,30	500	640	639	643	23	22,5	23,5
3	0,30	600	590	590	590	25	25	24
4	0,35	400	780	781	790	15	14,5	15
5	0,35	500	700	696	705	19,1	19	18
6	0,35	600	660	658	660	22	21,5	22
7	0,40	400	858	865	860	12	12,5	10,5
8	0,40	500	760	753	761	16	16,5	16,5
9	0,40	600	650	665	672	22	19,5	18,5

Варіант №7

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного звуження ϕ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\phi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного звуження $\phi \geq 67$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$430 \leq G_T \leq 510$$

$$65 \leq \phi \leq 75$$

Таблиця Г.7. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\phi, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	540	545	66	65	64
2	0,30	500	490	490	490	71	70	73
3	0,30	600	390	400	410	78	77	75
4	0,35	400	630	630	635	63	60	59
5	0,35	500	540	545	543	60	69	67
6	0,35	600	420	421	420	74	73	70
7	0,40	400	700	705	700	56	59	59
8	0,40	500	590	587	590	65	66	67
9	0,40	600	440	455	450	71	72	71

Варіант №8

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі значень межі текучості G_T та ударної в'язкості a_H :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T та ударної в'язкості $a_H \geq 240$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$690 \leq G_T \leq 710$$

$$200 \leq a_H \leq 220$$

Таблиця Г.8. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	G_T , МПа			a_H , Дж/см ²		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	545	555	220	215	220
2	0,30	500	492	485	490	240	245	240
3	0,30	600	400	410	420	268	270	275
4	0,35	400	630	625	625	150	145	155
5	0,35	500	540	540	545	190	195	185
6	0,35	600	420	418	421	230	225	230
7	0,40	400	690	703	710	100	110	100
8	0,40	500	580	595	595	160	165	170
9	0,40	600	450	445	450	200	205	207

Варіант №9

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і ударної в'язкості a_H :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $a_H \geq 200$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$810 \leq G_B \leq 830$$

$$200 \leq a_H \leq 220$$

Таблиця Г.9. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	G_B , МПа			a_H , Дж/см ²		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	700	691	220	215	220
2	0,30	500	640	643	647	239	240	235
3	0,30	600	590	591	590	270	275	265
4	0,35	400	780	780	780	150	151	155
5	0,35	500	700	710	700	190	195	198
6	0,35	600	660	660	665	230	235	235
7	0,40	400	860	861	858	100	110	106
8	0,40	500	760	763	765	160	160	160
9	0,40	600	660	658	662	197	200	205

Варіант №10

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного видовження δ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного видовження $\delta \geq 19$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$635 \leq G_T \leq 680$$

$$17 \leq \delta \leq 23$$

Таблиця Г.10. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	552	545	555	22	20.5	20.5
2	0,30	500	490	485	495	23	22.5	23.5
3	0,30	600	401	405	410	25	25.5	24.5
4	0,35	400	630	635	632	15	14.5	15.5
5	0,35	500	540	535	546	20	18.5	19.5
6	0,35	600	420	418	421	22	21.5	22.5
7	0,40	400	700	703	705	12,1	12.5	12
8	0,40	500	590	585	595	16,3	16	15,9
9	0,40	600	450	456	457	19	19.5	18.5

Варіант №11

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і відносного видовження δ :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $\delta \geq 18$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$650 \leq G_B \leq 720$$

$$14 \leq \delta \leq 20$$

Таблиця Г.11. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_B, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	685	687	21	20,5	20,5
2	0,30	500	640	639	643	23	22,5	23,5
3	0,30	600	590	590	590	25	25	24
4	0,35	400	780	781	785	15	14,5	15
5	0,35	500	700	696	705	19	19	19
6	0,35	600	660	658	660	22	21,5	22
7	0,40	400	860	865	860	12	12,5	12,5
8	0,40	500	760	753	761	16	16,5	16,5
9	0,40	600	650	665	670	19	19,5	18,5

Варіант №12

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного звуження ϕ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\phi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного звуження $\phi \geq 65$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$420 \leq G_T \leq 500$$

$$67 \leq \phi \leq 73$$

Таблиця Г.12. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	G_T , МПа			ϕ , %		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	540	545	66	65	64
2	0,30	500	490	490	490	71	70	73
3	0,30	600	400	400	400	78	77	75
4	0,35	400	630	630	635	61	60	59
5	0,35	500	540	545	543	67	67	67
6	0,35	600	420	421	420	74	73	73
7	0,40	400	700	705	700	58	59	59
8	0,40	500	590	587	590	65	66	67
9	0,40	600	450	455	450	71	72	71

Варіант №13

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі значень межі текучості G_T та ударної в'язкості a_H :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T та ударної в'язкості $a_H \geq 250$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$670 \leq G_T \leq 700$$

$$220 \leq a_H \leq 230$$

Таблиця Г.13. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_b, \text{МПа}$			$a_H, \text{Дж/см}^2$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	545	555	220	215	220
2	0,30	500	490	485	490	240	245	240
3	0,30	600	400	410	400	270	270	275
4	0,35	400	630	625	625	150	145	155
5	0,35	500	540	540	545	190	195	185
6	0,35	600	420	418	421	230	225	230
7	0,40	400	700	703	705	100	100	100
8	0,40	500	590	595	595	160	165	170
9	0,40	600	450	445	450	200	205	205

Варіант №14

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і ударної в'язкості a_H :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $a_H \geq 210$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$800 \leq G_B \leq 820$$

$$210 \leq a_H \leq 220$$

Таблиця Г.14. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	G_B , МПа			a_H , Дж/см ²		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	690	690	220	215	220
2	0,30	500	640	643	640	240	240	235
3	0,30	600	590	591	590	270	275	265
4	0,35	400	780	780	780	150	150	155
5	0,35	500	700	700	700	190	195	195
6	0,35	600	660	660	665	230	235	235
7	0,40	400	860	861	858	100	105	105
8	0,40	500	760	760	760	160	160	160
9	0,40	600	660	658	662	200	200	205

Варіант №15

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного видовження δ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного видовження $\delta \geq 18$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$650 \leq G_T \leq 690$$

$$18 \leq \delta \leq 20$$

Таблиця Г.15. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	545	555	21	20.5	20.5
2	0,30	500	490	485	495	23	22.5	23.5
3	0,30	600	400	405	410	25	25.5	24.5
4	0,35	400	630	635	632	15	14.5	15.5
5	0,35	500	540	535	545	19	18.5	19.5
6	0,35	600	420	418	421	22	21.5	22.5
7	0,40	400	700	703	705	12	12.5	12
8	0,40	500	590	585	595	16	16	16
9	0,40	600	450	455	457	19	19.5	18.5

Варіант №16

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і відносного видовження δ :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $\delta \geq 23$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$640 \leq G_B \leq 700$$

$$11 \leq \delta \leq 19$$

Таблиця Г.16. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_B, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	690	680	687	21	21,5	20,5
2	0,30	500	640	639	643	23	22,5	23,5
3	0,30	600	590	590	590	25	25	24
4	0,35	400	780	781	790	15	14,5	15
5	0,35	500	700	696	705	19,1	19	18
6	0,35	600	660	658	660	22	21,5	22
7	0,40	400	858	865	860	12	12,5	10,5
8	0,40	500	760	753	761	16	16,5	16,5
9	0,40	600	650	665	672	22	19,5	18,5

Варіант №17

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного звуження ϕ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\phi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного звуження $\phi \geq 67$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$430 \leq G_T \leq 510$$

$$65 \leq \phi \leq 75$$

Таблиця Г.17. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\phi, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	540	545	66	65	64
2	0,30	500	490	490	490	71	70	73
3	0,30	600	390	400	410	78	77	75
4	0,35	400	630	630	635	63	60	59
5	0,35	500	540	545	543	60	69	67
6	0,35	600	420	421	420	74	73	70
7	0,40	400	700	705	700	56	59	59
8	0,40	500	590	587	590	65	66	67
9	0,40	600	440	455	450	71	72	71

Варіант №18

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі значень межі текучості G_T та ударної в'язкості a_H :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T та ударної в'язкості $a_H \geq 240$.

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$690 \leq G_T \leq 710$$

$$200 \leq a_H \leq 220$$

Таблиця Г.18. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	G_T , МПа			a_H , Дж/см ²		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	550	545	555	220	215	220
2	0,30	500	492	485	490	240	245	240
3	0,30	600	400	410	420	268	270	275
4	0,35	400	630	625	625	150	145	155
5	0,35	500	540	540	545	190	195	185
6	0,35	600	420	418	421	230	225	230
7	0,40	400	690	703	710	100	110	100
8	0,40	500	580	595	595	160	165	170
9	0,40	600	450	445	450	200	205	207

Варіант №19

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі границі міцності G_B і ударної в'язкості a_H :

$$G_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень границі міцності G_B і відносного видовження $a_H \geq 200$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$810 \leq G_B \leq 830$$

$$200 \leq a_H \leq 220$$

Таблиця Г.19. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %		$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_B, \text{МПа}$			$a_H, \text{Дж/см}^2$		
				1	2	3	1	2	3
1	0,30		400	690	700	691	220	215	220
2	0,30		500	640	643	647	239	240	235
3	0,30		600	590	591	590	270	275	265
4	0,35		400	780	780	780	150	151	155
5	0,35		500	700	710	700	190	195	198
6	0,35		600	660	660	665	230	235	235
7	0,40		400	860	861	858	100	110	106
8	0,40		500	760	763	765	160	160	160
9	0,40		600	660	658	662	197	200	205

Варіант №20

1. По наведеним експериментальним даним побудувати математичні моделі межі текучості G_T і відносного видовження δ :

$$G_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Довести їх адекватність.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості G_T і відносного видовження $\delta \geq 19$

3. Визначити вміст вуглецю і температуру відпуску сталі для отримання:

$$635 \leq G_T \leq 680$$

$$17 \leq \delta \leq 23$$

Таблиця Г.20. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$G_T, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			1	2	3	1	2	3
1	0,30	400	552	545	555	22	20.5	20.5
2	0,30	500	490	485	495	23	22.5	23.5
3	0,30	600	401	405	410	25	25.5	24.5
4	0,35	400	630	635	632	15	14.5	15.5
5	0,35	500	540	535	546	20	18.5	19.5
6	0,35	600	420	418	421	22	21.5	22.5
7	0,40	400	700	703	705	12,1	12.5	12
8	0,40	500	590	585	595	16,3	16	15,9
9	0,40	600	450	456	457	19	19.5	18.5

ДОДАТОК Д

Таблиця аналізу сили зв'язку між змінними

Таблиця Д.1. Інтерпретація коефіцієнта кореляції

Значення коефіцієнта кореляції	Інтерпретація
Від 0 до 0,3	Дуже слабка
Від 0,3 до 0,5	Слабка
Від 0,5 до 0,7	Середня
Від 0,7 до 0,9	Висока
Від 0,9 до 1	Дуже висока

Оцінюється модуль коефіцієнта кореляції. Його знак (“+” чи “-”) показує напрямок впливу “Х” на “У”. Якщо коефіцієнт виходить негативним, це означає зворотний взаємозв'язок: тобто зі збільшенням однієї змінної, інша зменшується.

Наприклад:

- якщо величина коефіцієнта кореляції між змінними -0,36, це слабка негативна кореляція, і швидше за все її не можна приймати в розрахунок;
- якщо величина коефіцієнта кореляції дорівнює 0, отже змінні не пов'язані між собою;
- якщо величина коефіцієнта кореляції між змінними дорівнює 0,25 то це дуже слабка кореляція і в більшості випадків її можна також не брати до уваги;
- якщо величина коефіцієнта кореляції між змінними дорівнює 0,75 то це висока кореляція і в своїх інтерпретаціях потрібно звернути на неї увагу;

- якщо величина коефіцієнта кореляції дорівнює 1, спостерігається функціональний лінійний зв'язок.

ДОДАТОК Е

Таблиця значень критерію Фішера

Таблиця Е.1. Значення критерію Фішера при довірчій ймовірності $P=0,95$

f_{ad}										
f_{vid}	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	161.45	199.50	215.71	224.58	230.16	233.99	236.77	238.88	240.54	241.88
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.96
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10	4.06
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.18	3.14
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	3.01	2.95	2.90	2.85
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80	2.75
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.83	2.77	2.71	2.67
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65	2.60
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.71	2.64	2.59	2.54

$f_{ad} = m$ – ступінь свободи адекватності де m – це кількість факторів у побудованій регресійній моделі; $f_{vid} = n - m - 1$ – ступінь свободи відтворюваності де n – кількість дослідів (експериментальних точок).

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	3
Комп'ютерний практикум №1 Моделювання нагрівання металевого виробу - 1.....	5
Комп'ютерний практикум № 2 Моделювання нагрівання металевого виробу - 2.....	15
Комп'ютерний практикум № 3 Метод найменших квадратів_Факторні плани першого та другого порядків	26
Комп'ютерний практикум № 4 Симлекс-загратований планований експеримент для побудови моделі «склад-властивості сплаву»	48
Комп'ютерний практикум № 5 Багатокритеріальна оптимізація методом послідовних поступок	59
Комп'ютерний практикум № 6 Підготовка імітаційних моделей кристалізації металів і сплавів для проведення комп'ютерного експерименту	67
Комп'ютерний практикум № 7 Вплив швидкості охолодження на утворення осередків твердої фази при гомогенній кристалізації	90
Комп'ютерний практикум № 8 Вплив модифікатора на утворення осередків твердої фази при кристалізації алюмінію.....	95
Комп'ютерний практикум № 9 Вплив швидкості охолодження на утворення зародків твердої фази при кристалізації сплаву Al-Si	98
Комп'ютерний практикум № 10 Комп'ютерний експеримент для дослідження впливу умов охолодження при кристалізації на формування структури твердого металу.....	109
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	115

ДОДАТОК А Таблиці з номерами індивідуальних завдань та вихідні дані для розрахунків в комп'ютерних практикумах №1 та №2	116
ДОДАТОК Б Варіанти завдань для розрахунків в комп'ютерному практикумі №3	118
ДОДАТОК В Варіанти завдань для розрахунків в комп'ютерному практикумі №4	127
ДОДАТОК Г Варіанти завдань для розрахунків в комп'ютерному практикумі №5	129
ДОДАТОК Д Таблиця аналізу сили зв'язку між змінними.....	149
ДОДАТОК Е Таблиця значень критерію Фішера.....	151



Доній Олександр Миколайович

доктор технічних наук,
професор кафедри фізичного матеріалознавства
та термічної обробки НН ІМЗ ім. Є.О. Патона
КПІ ім. Ігоря Сікорського. Навчально-педагогічний
та науковий стаж більше 40 років. Лауреат премії
Фонду Сороса, Міжнародної соросовської
програми освіти в галузі точних наук. Автор понад
130 наукових та 5 навчально-методичних праць,
2 авторських свідоцтв та 4 патентів.



Христенко Вадим Володимирович

кандидат технічних наук (ливарне виробництво),
колишній доцент кафедри фізичного
матеріалознавства та термічної обробки
НН ІМЗ ім. Є.О. Патона КПІ ім. Ігоря Сікорського.
Як професійний інженер та організатор реального
виробництва сформувався в ході роботи на
Броварському заводі алюмінієвих конструкцій.
Як вчений постав в Фізико-технологічному
інституті металів та сплавів НАН України.
Навчально-педагогічний та науковий стаж більше
25 років. Автор понад 90 наукових праць та
5 патентів.



Яворський Юрій Васильович

кандидат фізико-математичних наук,
доцент кафедри фізичного матеріалознавства
та термічної обробки НН ІМЗ ім. Є.О. Патона
КПІ ім. Ігоря Сікорського. Навчально-педагогічний
та науковий стаж більше 10 років. Лауреат премій
"Молодий викладач-дослідник 2019-2022 рр",
"Молодий вчений року 2021", стипендіат
стипендії Кабінету міністрів України. Автор понад
60 наукових та 6 навчально-методичних праць,
4 патентів.