

Міністерство освіти і науки України

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

О. М. Доній, Р. В. Лютий, М. М. Ямшинський

МАТЕМАТИЧНЕ І КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Навчальний посібник

*Затверджено Вченою радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів вищої освіти, які
навчаються за спеціальністю G10 «Металургія»*

Електронне мережне навчальне видання

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2026

Укладачі:	<i>Доній Олександр Миколайович, д.т.н., професор Лютій Ростислав Володимирович, д.т.н., професор Ямшинський Михайло Михайлович, д.т.н., професор</i>
Рецензент	<i>Мініцький А. В., д.т.н, проф., кафедра високотемпературних матеріалів порошкової металургії, НН ІМЗ ім. Є.О. Патона, КПП ім. Ігоря Сікорського</i>
Відповідальний редактор	<i>Могилаченко В. Г., д.т.н., проф., кафедра ливарного виробництва НН ІМЗ ім. Є.О. Патона, КПП ім. Ігоря Сікорського</i>

*Гриф надано Вченою радою КПП ім. Ігоря Сікорського
(протокол № 7 від 08.05.2026 р.)*

*за поданням Вченої ради НН Інституту матеріалознавства та зварювання імені Є. О. Патона
(протокол № 3/26 від 08.04.2026 р.)*

Доній О. М.

Д 11 Математичне і комп'ютерне моделювання. Комп'ютерний практикум. [Електронний ресурс] : навч. посіб. для здобувачів ступеню магістра за освітньою програмою «Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві» спец. G10 Металургія / КПП ім. Ігоря Сікорського : уклад.: О.М. Доній, Р. В. Лютій, М. М. Ямшинський – Електрон. текст. дані (1 файл). – Київ : КПП ім. Ігоря Сікорського, 2025. – 115 с.

Математичне і комп'ютерне моделювання є сучасним та ефективним методом наукових досліджень. Багато фізико-хімічних процесів, які складають основи технології ливарного виробництва, відбуваються одночасно. Експериментальне їх дослідження потребує великих енергетичних та ресурсних затрат. Тому застосування методів математичного і комп'ютерного моделювання, створення відповідних моделей дає змогу досліджувати особливості процесів ливарного виробництва, таких як: нагрівання та охолодження, структуроутворення у виливках під час кристалізації та інші. Це надає можливість свідомо підійти до удосконалення промислових технологій. Посібник «Математичне і комп'ютерне моделювання» написано у відповідності до програми (силабусу) дисципліни «Математичне і комп'ютерне моделювання» для здобувачів вищої освіти інженерних, технічних та технологічних напрямів підготовки і спеціальностей вищих навчальних закладів України III–IV рівнів акредитації. Також посібник буде корисний для аспірантів, наукових працівників фізичних факультетів університетів і фахівців інших технічних спеціальностей, які у своїй діяльності зв'язані з науковими дослідженнями, розробленням промислових технологій тощо.

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

Реєстр. № 25/26-330. Обсяг 5,18 авт. арк.

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» проспект

Берестейський, 37, м. Київ, 03056

<https://kpi.ua>

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

© КПП ім. Ігоря Сікорського, 2026

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	5
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 1. АНАЛІТИЧНЕ І ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ	7
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 2. МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ ТА БАГАТОКРИТЕРІАЛЬНА ОПТИМІЗАЦІЯ МЕТОДОМ ПОСЛІДОВНИХ ПОСТУПОК	24
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 3. КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВПЛИВУ ШВИДКОСТІ ОХОЛОДЖЕННЯ НА УТВОРЕННЯ ОСЕРЕДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ В ПРОЦЕСІ ГОМОГЕННОЇ КРИСТАЛІЗАЦІЇ.....	44
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 4. КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВПЛИВУ МОДІФІКАТОРА НА УТВОРЕННЯ ОСЕРЕДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ АЛЮМІНІЮ.....	67
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 5. КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ МОЖЛИВОСТЕЙ КЕРОВАНОГО ВПЛИВУ УМОВ ОХОЛОДЖЕННЯ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ НА ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ ТВЕРДОГО МЕТАЛУ	69
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 6. ВПЛИВ ШВИДКОСТІ ОХОЛОДЖЕННЯ НА УТВОРЕННЯ ЗАРОДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ СПЛАВУ Al-Si.....	74
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	84
ДОДАТОК А. ТАБЛИЦІ З НОМЕРАМИ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ ТА ВИХІДНІ ДАНІ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ У КОМП'ЮТЕРНИХ ПРАКТИКУМАХ № 1 і № 2	85
ДОДАТОК Б. КОМП'ЮТЕРНА ПРОГРАМА ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ОБЧИСЛЕНЬ У КОМП'ЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМІ № 1 НА МОВІ «QBASIC», ЯКА РЕАЛІЗУЄ ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО РІВНЯННЯ ПЕРШОГО ПОРЯДКУ МЕТОДОМ ЕЙЛЕРА	87
ДОДАТОК В. ВАРІАНТИ ПЕРШОЇ ЧАСТИНИ ЗАВДАНЬ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ У КОМП'ЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМІ № 2	89
ДОДАТОК Г. ВАРІАНТИ ДРУГОЇ ЧАСТИНИ ЗАВДАНЬ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ У КОМП'ЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМІ № 2	98
ДОДАТОК Д. КОМП'ЮТЕРНІ ПРОГРАМИ ДЛЯ ПРАКТИКУМУ №2	113

ПЕРЕДМОВА

Одним із шляхів поліпшення конкурентоспроможності продукції ливарного виробництва є розроблення нових та удосконалення наявних технологічних процесів. Одним із сучасних напрямків створення передових технологій є використання методів математичного і комп'ютерного моделювання. Існують математичні моделі, які дають змогу розраховувати теплопередачу під час формуванні виливків, швидкість переміщення фронту кристалізації тощо. Вагомий внесок у цьому напрямку внесли роботи Вейника А. І., Баландіна Г. Ф. та інших. Однак наявні математичні моделі не завжди дають змогу досить точно описати процеси, які відбуваються під час застосування ливарних технологій. Наприклад, у процесі кристалізації формується первинна структура литого металу, яка суттєво впливає на властивості сплаву в твердому стані. Математичний опис такого процесу надто складний, що пояснюється складністю процесу тверднення, який являє собою ряд теплофізичних та хімічних взаємодій, які відбуваються майже одночасно. Тому все частіше застосовуються методи комп'ютерного моделювання. Створення комп'ютерних моделей дає змогу досліджувати особливості процесів структуроутворення у виливках під час кристалізації та свідомо підійти до удосконалення ливарних технологій.

Від сучасного спеціаліста вимагається не тільки глибоке розуміння фізико-хімічної основи технологій, але і вміння надавати конкретні рекомендації щодо оптимального керування ними. Моделювання є одним із методів наукових досліджень, його широко застосовують у таких царинах як математика, фізика, астрономія, хімія тощо. Будь-який розрахунок (навіть найелементарніший) пов'язано із застосуванням моделей. Тому фахівець в ході інженерної діяльності зобов'язаний знати і усвідомлено застосовувати моделювання.

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

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

Цикл комп'ютерних практикумів з дисципліни «Математичне і

комп'ютерне моделювання» спрямовано на формування у студентів уміння практичного застосовування засвоєного теоретичного матеріалу. А саме:

- виявляти та формулювати проблеми у сфері матеріалознавства та ливарного виробництва, приймати ефективні рішення для їх розв'язання;
- на відповідному рівні планувати та здійснювати дослідження у сфері матеріалознавства та ливарного виробництва в лабораторних та виробничих умовах із застосовуванням 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, які викладено у посібнику. В ході підготовки студент із наведеного у посібнику списку літератури обирає ті видання, які є наявними у бібліотеці або мережі Інтернет та більш доступні йому за рівнем викладання.

Звіт за кожне із практичних занять має відповідати змісту, наведеному у посібнику. 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, близького 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 необхідно: комп'ютер зі встановленими ОС не нижче MS Windows 95 та пакетом офісних програм не нижче MS Office 97.

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 1.

АНАЛІТИЧНЕ І ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ

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

1.1. Аналітична математична модель нагрівання заготовки в печі

Термічне оброблення дає змогу отримати необхідні структуру і властивості матеріалу. Загалом воно полягає у зміні температури оброблюваної заготовки за відповідним алгоритмом. Одними із найважливіших технологічних параметрів термічного оброблення є температура і тривалість нагрівання. Для визначення тривалості нагрівання металевого виробу можна застосувати математичне моделювання.

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

Вочевидь, неоднорідність внутрішньої структури матеріалу деталі (наприклад, сталі) не буде грати істотної ролі в процесі 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 в процесі нагрівання. 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, яке 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 із простором печі відбувається за законом Ньютона – Рихмана, тобто променевим теплообміном знехтуємо. Це спрощує об'єкт моделювання, хоча слід зазначити, що його справедливність залежить від температури печі T_f та ступеню чорноти поверхні виробу.

Тоді, відповідно до закону Ньютона – Рихмана:

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

де $T(t)$ – температура заготовки в ході нагрівання, К;

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, яку будемо вважати сталою, Дж/(кг·К);

m – маса металу, кг.

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

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

Маса заготовки в ході нагрівання не змінюється, а незначною зміною розмірів поверхні, яка пов'язана з розширенням тіла в процесі підвищення 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 в 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 за умови прийнятих обмежень і спрощень. Це рівняння дає наближений аналітичний опис кінетики нагрівання за умови достатньо обґрунтованих припущень у постановці задачі. Деякі неточності, притаманні цій 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 під час збільшення 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. 1.1). Інакше кажучи, температура заготовки досягне температури печі після нескінченно довгого нагрівання. Така, дещо абсурдна, ситуація виникає як наслідок припущень і спрощень, які було зроблено під час формулювання 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 із 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, 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 $T_k = T_f - 0,01 \times \Delta T_f$ 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:

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

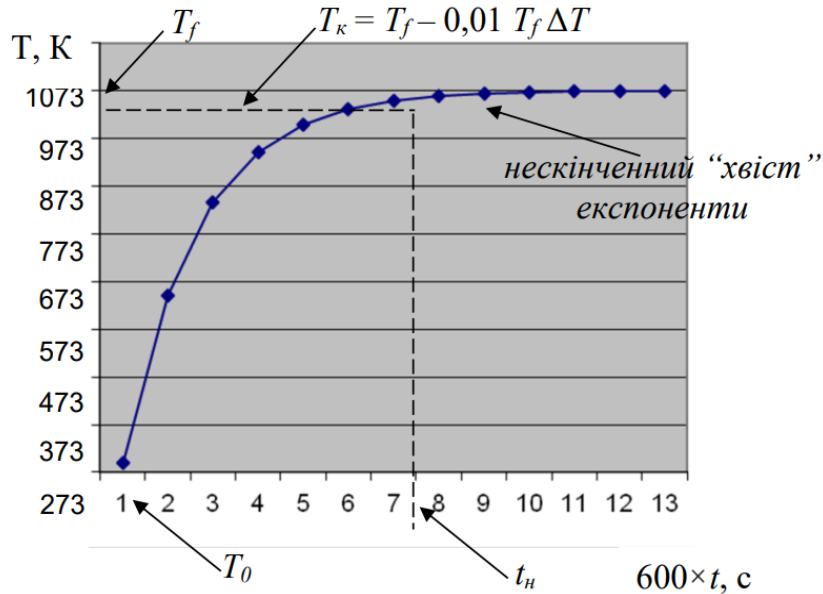


Рис. 1.1. Зміна температури заготовки $T(t)$ із часом нагрівання t :
 T_f – температура печі, К; T_0 – початкова температура, К; ΔT – похибка вимірювання температури, %; T_k – температура закінчення розрахунків; t_n – тривалість нагрівання, с

Логарифмуючи (1.10) отримаємо:

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

1.2. Приклад розрахунку тривалості нагрівання заготовки в печі («вручну» – на калькуляторі)

Припустимо, що задано діаметр заготовки, яка нагрівається, $D = 4$ см, а її довжина $l = 20$ см (табл. А.1). Тоді не важко обчислити її поверхню $S = 2\pi Rl + 2\pi R^2$ (або $S \approx 0,060$ м²) та об'єм $V = \pi R^2 l$ чи $V \approx 0,9 \cdot 10^{-4}$ м³ (відповідні формули для тіл різної геометрії показано в додатку А, табл. А.3). **Нагадування:** всі розрахунки слід здійснювати в системі СІ.

Заготовку зроблено з алюмінію, густина якого $\rho = 2\,700$ кг/м³, а її маса становить $m = \rho V = 2,43$ кг. Коефіцієнт тепловіддачі беремо (наприклад) $\alpha = 100$ Дж/(с·м²·К).

Для визначення коефіцієнта k , який описано виразом (1.8), потрібно визначити числове значення питомої теплоємності c . Відомо, що питома теплоємність c нелінійно залежить від температури $c = f(T)$. Її зазвичай описують за

допомогою тієї чи іншої апроксимації (ця операція є наближенням). Однією з найбільш вживаних є апроксимація достатньо складним ступеневим 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 цій роботі для спрощення розрахунків можна обмежитися ще більш простою лінійною апроксимацією.

У процесі побудови математичної моделі (1.7) використано спрощення, що $c = const$, і потрібно визначити її значення в середині температурного інтервалу нагрівання. Для цього можна використати лінійну апроксимацію відомим рівнянням прямої, яка проходить через дві точки:

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

де c_1 , c_2 , T_1 та T_2 – значення відповідно питомої теплоємності та температури у певних точках.

Рівняння (1.12) зручно звести до вигляду:

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

де a_0 та a_1 – коефіцієнти апроксимації.

Значення питомої теплоємності у двох температурних точках (300 К та 800 К) для Al наведено в табл. А.2 Тоді в цьому випадку рівняння (1.12) буде:

$$\frac{c - 904}{1154 - 904} = \frac{T - 300}{800 - 300}$$

Нагрівання починається від температури $T_0 = 20^\circ\text{C}$ (або 293 К), температура печі $T_f = 750^\circ\text{C}$ (або 1023 К), похибка вимірювання температури $\Delta T = 5\%$. Визначимо температуру закінчення розрахунків: $\Delta T = 5\%$ від $T_f = 1023$ К складає 51,15 К або ~ 51 К (має сенс вести розрахунки з точністю в 1 градус), тоді температура закінчення розрахунків $T_k = 1023 - 51 = 972$ К.

Середина температурного інтервалу між 293 К та 1023 К буде 658 К. Питома теплоємність для такої температури ~ 1083 Дж/(кг·К), а коефіцієнт $k = 2,3 \cdot 10^{-3}$ 1/с, відповідно до виразу (1.8).

Далі підставляємо в (1.11) всі числові дані і отримуємо:

$$t_n = -\frac{1}{0.0023} \ln \left(\frac{1023 - 972}{1023 - 293} \right) \cong 1157 \text{ с.}$$

Таким чином тривалість нагрівання в цьому прикладі складає 1157 с або приблизно 20 хв.

Зауваження. Під час виконання розрахунків (і не тільки в цьому практикумі) можна 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. У блоках 1, 3, 5, 7 алгоритму вводяться необхідні для розрахунків дані, а у блоках 2, 4, 6, 8 відповідно обчислюються:

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

Ці параметри дають можливість розрахувати величину коефіцієнта k , який визначає швидкість (блок 9), та тривалість нагрівання t_n (блок 10). Для побудови графіка залежності температури від часу в ході нагрівання, розрахунки за формулою (1.7) виконуються в блоці 11, а їх результати та час нагрівання t_n виводяться в блоці 12.

1.3. Чисельна математична модель нагрівання заготовки в печі

Математичну модель можна уточнити, якщо змінити деякі спрощення, які було зроблено перед її побудовою. 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 °С до 1000 °С теплоємність сталі змінюється на 20–30 %. За високих температур 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).

Для апроксимації залежності питомої теплоємності від температури можна використати вираз (1.13).

З метою врахування як конвективної, так і радіаційної теплопередачі, кількість поглиненого від печі тепла dQ_f описується законом повної тепловіддачі:

$$dQ_f = aS[T_f - T(t)]dt + \sigma \varepsilon S[T_f^4 - T^4(t)]dt, \quad (1.14)$$

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 набуває такого вигляду:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{k_1[T_f - T(t)] + k_2[T_f^4 - T^4(t)]}{a_0 + a_1 T(t)}, \quad (1.15)$$

$$T(0) = T_0 \quad (1.16)$$

де:

$$k_1 = \frac{aS}{m}, \quad (1.17)$$

$$k_2 = \frac{\sigma \varepsilon S}{m}, \quad (1.18)$$

Вираз (1.15) 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.

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

$$y' = f(x, y), \quad (1.19)$$

$$y(x_0) = y_0, \quad (1.20)$$

де (1.20) має фізичний зміст початкової умови.

Розв'язком диференціального рівняння є функція $y(x)$. У разі застосування чисельного методу вона буде подана у вигляді таблиці. Під час

побудови такої таблиці потрібно вказати інтервал зміни аргумента x цієї функції $[x_0, x_N]$. Також необхідно вибрати крок $h = \text{const}$, з яким буде змінюватись аргумент x на цьому інтервалі. Тобто розв'язок має вигляд табл. 1.1. При цьому перший рядок табл. 1.1 вже відомий. Ця точка з номером $i = 0$ є додатковою (початковою) умовою (1.20) в задачі Коші.

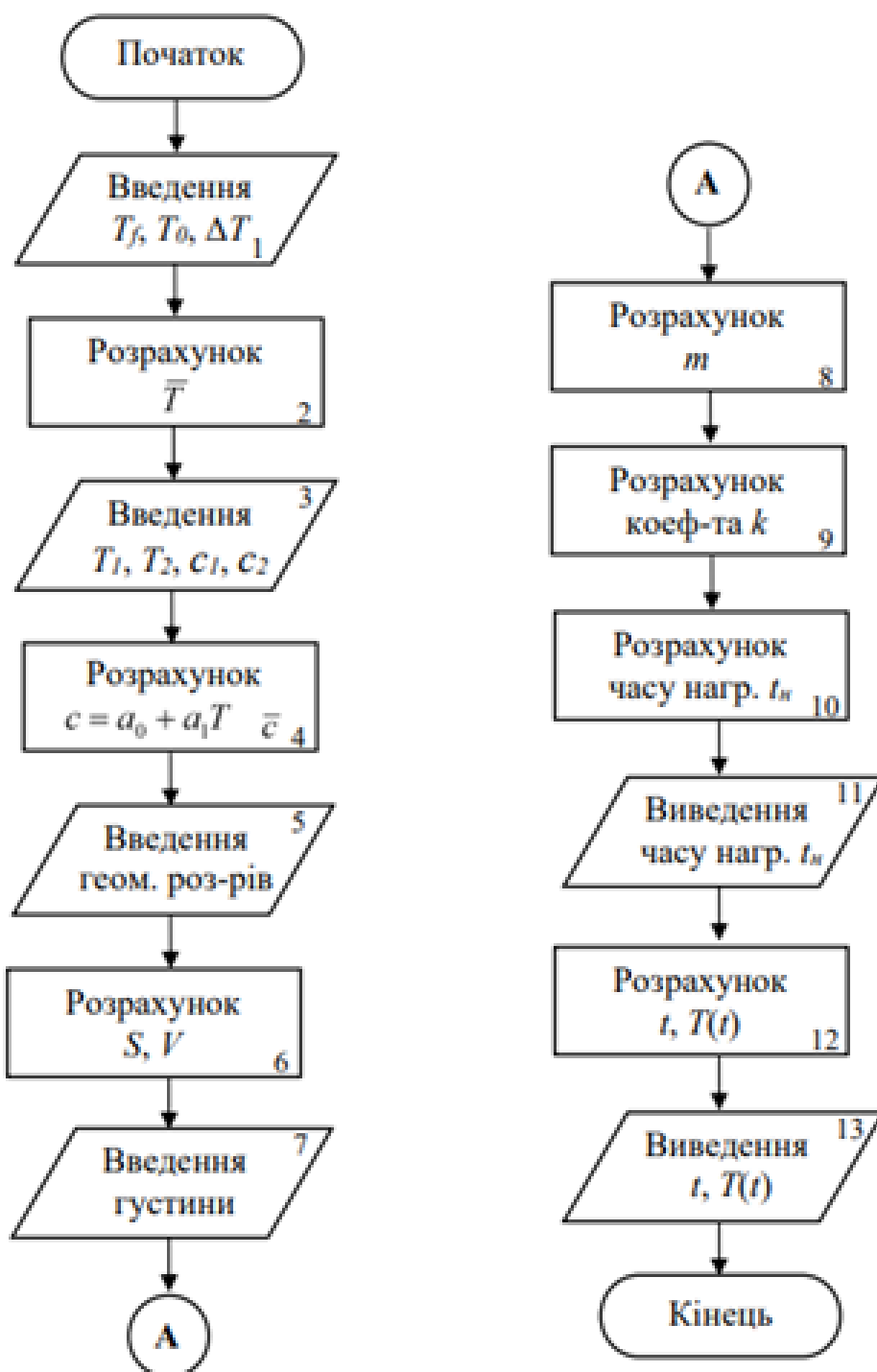


Рис. 1.2. Алгоритм комп'ютерної програми для розрахунку тривалості нагрівання заготовки t_n та залежності температури від часу в ході нагрівання

В основі методу Ейлера лежить розкладання функції $y(x)$ (яка є розв'язком рівняння) в ряд Тейлора в малій ε -околиці точки x_i . Цей ряд має вигляд:

$$y(x_0 + \varepsilon) = y(x_0) + \varepsilon y'(x_0) + \frac{\varepsilon^2}{2!} y''(x_0) + \frac{\varepsilon^3}{3!} y'''(x_0) + \dots \quad (1.21)$$

Таблиця 1.1. 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

У знаменниках коефіцієнтів виразу (1.21), які розташовано 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):

$$y(x_0 + \varepsilon) \cong y(x_0) + \varepsilon y'(x_0). \quad (1.22)$$

Для табл. 1.1 крок h можна вважати ε -околицею (тобто $h = \varepsilon$), тому неважко визначити, що

$$y(x_0) = y_0 \quad (1.23)$$

$$y(x_0 + \varepsilon) = y(x_0 + h) = y(x_1) = y_1. \quad (1.24)$$

Підставляючи (1.23) та (1.24) в (1.22) та враховуючи, що $y'(x_0)$ це є права частина рівняння (1.19) в точці x_0 (тобто $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$), отримуємо:

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0). \quad (1.25)$$

Таким чином, знаючи x_0 та y_0 з початкової умови (1.20) і розрахувавши значення правої частини вихідного рівняння (1.19) в цих точках $f(x_0, y_0)$, отримуємо за допомогою (1.25) нове значення y_1 , яке і заносимо до табл. 1.1.

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

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1), \quad (1.26)$$

або в загальному вигляді:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i). \quad (1.27)$$

Загальна ітераційна формула (1.27) для чисельного розв'язку задачі (1.19) – (1.20) дає змогу за відомими значеннями аргумента x_i і функції y_i на i -тому кроці знайти значення функції y_{i+1} на наступному $i+1$ -му кроці. Таким чином розраховуються значення функції у всіх точках табл. 1.1, яка і є розв'язком задачі Коші. Точність методу залежить від вибору кроку розрахунків. Чим менший крок, тим точність вища.

За умови застосування методу Ейлера, ітераційна формула для рівняння (1.15) має вигляд:

$$T_{i+1} = T_i + hf(t_i, T_i). \quad (1.28)$$

Або, підставляючи в (1.27) замість $f(t_i, T_i)$ праву частину рівняння (1.15), вона буде:

$$T_{i+1} = T_i + \frac{k_1[T_f - T_i] + [T_f^4 - T_i^4]}{a_0 + a_1 T_i} \quad (1.29)$$

Розв'язок задачі (1.15) – (1.16) після завершення обчислень буде мати вигляд, який наведено у табл. 1.2.

Таблиця 1.2. Чисельний розв'язок диференціального рівняння (1.15) 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 (1.15).

1.4. Приклад розв'язку задачі (1.15) – (1.16) методом Ейлера

Припустимо, що діаметр заготовки, яка нагрівається, $D = 0,03$ м, а довжина $l = 1,00$ м. Тоді не важко обчислити її поверхню $S \approx 0,095 \text{ м}^2$ та об'єм $V \approx 7,069 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3$ (див. п. 1.2). Заготовку зроблено із сталі, густина якої $\rho = 7870 \text{ кг/м}^3$, а її маса становить $m = \rho V \approx 5,56 \text{ кг}$. Ступінь чорноти поверхні умовно вибираємо $\varepsilon = 0,5$. Нагрівання починається від 20°C (або 293 K), температура печі $T_f = 1000^\circ\text{C}$ (або 1273 K), похибка вимірювання температури $\Delta = 5\%$ ($\sim 64 \text{ K}$). Тоді температура закінчення розрахунків $T_k = T_f - \Delta T$ ($\sim 1210 \text{ K}$). Постійна Стефана – Больцмана $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Дж/(с} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{K}^4)$, коефіцієнт тепловіддачі $\alpha = 10 \text{ Дж/(с} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{K)}$. Тоді числові значення коефіцієнтів k_1 , k_2 відповідно до (1.17) та (1.18) будуть: $k_1 = 0,172 \text{ Дж/(с} \cdot \text{кг} \cdot \text{K)}$, а $k_2 = 4,875 \cdot 10^{-10} \text{ Дж/(с} \cdot \text{кг} \cdot \text{K}^4)$.

Значення питомої теплоємності заліза за температури 300 K становить $\sim 450 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$, а за температури 800 K відповідно $\sim 680 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{K)}$. Апроксимуючи залежність теплоємності від температури (як показано в п. 1.2) отримуємо:

$$c(T) = 312 + 0,46 \cdot T. \quad (1.30)$$

Враховуючи (1.30), ітераційна формула (1.29) набуває вигляду:

$$T_{i+1} = T_i + h \frac{0,172(1273 - T_i) + 4,875 \cdot 10^{-10}(1273^4 - T_i^4)}{312 + 0,46 \cdot T_i}. \quad (1.31)$$

Для обчислень виберемо крок за часом $h = 10 \text{ с}$. Значення функції $T(t)$, які обчислюються за допомогою виразу (1.31), заносяться в до табл. 1.3. У перший стовпчик таблиці заноситься номер ітерації, у другий – час нагрівання. Третій і четвертий стовпчики містять температуру зразка, який нагрівається (відповідно, у Кельвінах і градусах за Цельсієм). Значення температури в розрахунку за (1.31) беруться із третього стовпчика, а четвертий – служить для ілюстрації динаміки нагрівання у більш сприятливому вигляді.

Перший рядок ($i = 0$), як зазначалось, являє собою початкову умову (1.16), її записуємо в таблицю без обчислень (наприклад $T_0 = 20^\circ\text{C} = 293 \text{ K}$, див. табл. 1.3). Застосовуючи формулу (1.31), заповнюємо другий рядок ($i = 1$), при цьому як T_0 береться значення температури з попереднього рядка $i = 0$ (третій стовпчик):

$$T_1 = 293 + 10 \frac{0,172(1273 - 293) + 4,875 \cdot 10^{-10}(1273^4 - 293^4)}{312 + 0,46 \cdot 293} = 324. \quad (1.32)$$

Отримане значення $T_1 = 324$ К записуємо до табл. 1.3. Таким же чином визначаємо температуру в наступному рядку $i = 2$:

$$T_2 = 324 + 10 \frac{0,172(1273-324)+4,875 \cdot 10^{-10}(1273^4-324^4)}{312+0,46 \cdot 324} = 354 \quad . \quad (1.33)$$

Аналогічно розраховуються всі наступні температури. У табл. 1.3 наведено динаміку температури зразка, який нагрівається, за першу хвилину з інтервалом 10 секунд.

Таблиця 1.3. Розраховані значення температури заготовки в процесі її нагрівання

i	$t, \text{с}$	$T, \text{К}$	$T, ^\circ\text{C}$
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

Подібні розрахунки зручно виконувати з допомогою комп'ютерної програми. На рис. 1.3 наведено алгоритм числового розв'язання задачі (1.15) – (1.16) про нагрівання заготовки для термічного оброблення, 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).

У блок 1 вводяться вхідні дані для розрахунку:

- початкова температура (T_0);
- температура печі (T_f);
- температура кінця розрахунків (T_k);
- коефіцієнт тепловіддачі (α);
- постійна Стефана – Больцмана (σ);
- ступінь чорноти поверхні (ε);
- густина матеріалу (ρ);
- коефіцієнти апроксимації (a_0, a_1);

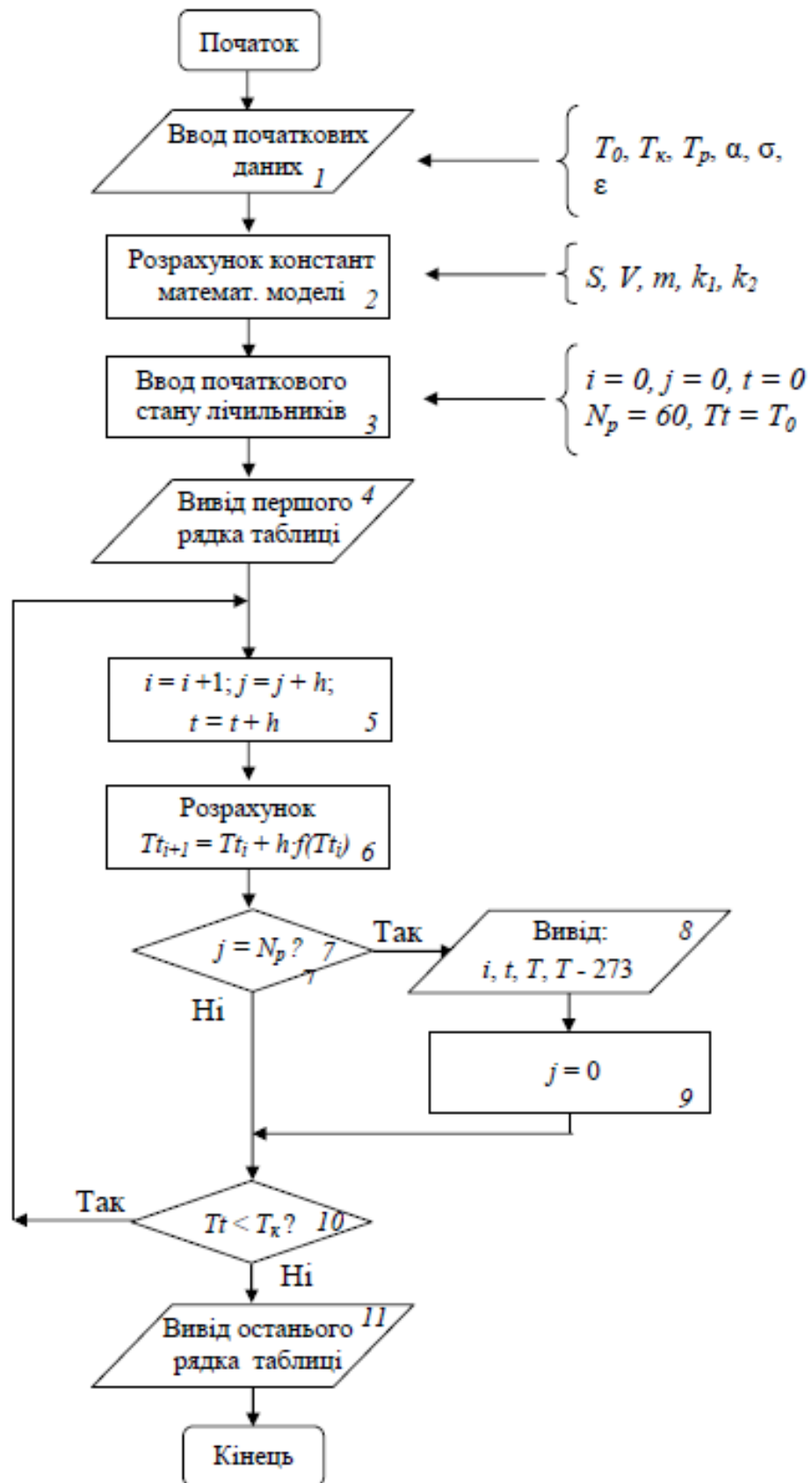


Рис. 1.3. Блок-схема алгоритму розрахунків числової нелінійної математичної моделі із зосередженими параметрами

- геометричні розміри, залежно від геометрії заготовки (довжина l_1 , ширина l_2 і висота l_3 або 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 виведення інформації, t – тривалість нагрівання. N_p вказує, через який проміжок часу нагрівання (у секундах) робити виведення результатів на екран або на друк. Також у цьому блоці задається перше значення температури для початку обчислень ($T_i = T_0$).

Перший рядок таблиці результатів розрахунку відповідає початку нагрівання, тобто моменту часу $t = 0$, і являє собою початкову умову. У блоці 4 передбачено його виведення на екран (на друк).

У блоці 5 відбувається поступове збільшення лічильників, сам розрахунок, відповідно до виразу (1.29) відбувається у блоці 6.

За невеликого кроку h розрахунків (для достатньої їх точності) та відносно великому часі спостереження, кількість ітерацій буде занадто великою для виведення інформації на екран або друк. Для оцінки динаміки нагрівання та побудови відповідного графіка достатньо 5–10 точок. Тому в алгоритмі передбачено виведення результатів розрахунків із деяким інтервалом (блоки 7, 8, 9). Умова перевірки необхідності виведення результатів розрахунку перевіряється у блоці 7. Якщо часовий лічильник j збігається з N_p , то виводиться рядок (блок 8), у якому наявні номер ітерації i , тривалість нагрівання t , абсолютна температура заготовки. Потім часовий лічильник «скидається» на нуль ($j = 0$, блок 9) і управління передається на блок 10. За невиконання умови у блоці 7 блоки 8 і 9 не працюють і управління відразу передається у блок 10. У блоці 10 перевіряється умова закінчення розрахунків. Якщо обчислене значення температури ($T(t)$) не досягло температури закінчення розрахунку (T_k), то управління передається у блок 5. За невиконання умови $T(t) < T_k$ виводяться останні розраховані результати й обчислення припиняються.

Правильність роботи програми (після усунення синтаксичних помилок) обов'язково перевіряється на так званому **«контрольному прикладі»**. У нашому випадку контрольним прикладом може служити порівняння результатів комп'ютерних розрахунків із результатами, отриманими з використанням математичної моделі (1.7).

1.5. Порядок виконання роботи

Завдання на виконання комп'ютерного практикуму наведено в Додатку А (табл. А.1). Всі розрахунки виконуються в системі СІ.

1. Розрахувати час нагрівання заготовки t_n , використовуючи аналітичну математичну модель (1.11). Для цього потрібно:

- розрахувати площу поверхні S для заданої геометрії зразка;
- масу та m об'єм V зразка;
- виконати апроксимацію залежності питомої теплоємності c від температури у вигляді рівняння (1.13) та визначити її значення в середині температурного інтервалу нагрівання;
- провести розрахунок коефіцієнта k за формулою (1.8);
- визначити тривалість нагрівання заготовки за виразом (1.7).

Як проводити розрахунки – детально показано на прикладі в п. 1.2.

2. Побудувати графік процесу нагрівання, використовуючи математичну модель (1.7).

За бажанням для виконання розрахунків пп. 1 та 2 порядку виконання роботи можна створити програму, алгоритм якої наведено на рис. 1.2 (мова програмування довільна).

3. Повторити розрахунки, використовуючи чисельну математичну модель (1.29). Для цього у середовищі алгоритмічної мови (мова програмування довільна) ввести текст комп'ютерної програми, алгоритм якої наведено на рис. 1.3. Її варіант на мові *QBasic* представлено в Додатку Б. У процесі введення комп'ютерної програми, в разі необхідності, ввести зміни для формул площі поверхні та об'єму відповідно до завдання. Перевірити її працездатність на контрольному прикладі, в якості якого використати результати розрахунків у п. 1 порядку виконання роботи. Якщо результати розрахунків співпадають, то перейти до виконання п. 4. Якщо вони не співпадають, то потрібно виявити помилку в розрахунках п. 1 або в тексті програми.

4. Провести розрахунки температур під час нагрівання заготовки за різних варіантів математичної моделі (1.29), використовуючи комп'ютерну програму, алгоритм якої наведено на рис. 1.3. Рекомендований крок розрахунків $h = 1$ с. Варіанти розрізняються значеннями a_0 , a_1 та ε .

Для проведення цих розрахунків потрібно:

- а) ввести $a_0 = c$ (Дж / (кг·К)), значення c розраховано в п. 1 порядку виконання роботи, $a_1 = 0$, $\varepsilon = 0$, та визначити t_n , $T = f(t)$.

Цей варіант розрахунків фактично дублює результати, які було зроблено у пп. 1 та 2 порядку виконання роботи для аналітичної математичної моделі. Проте у комп'ютерній програмі використовується чисельний метод розв'язку диференціального рівняння (метод Ейлера). Аналіз отриманих результатів дає змогу оцінити якість застосування чисельного методу порівняно з аналітичним розв'язком задачі (1.5) – (1.6) (формула (1.7));

б) зробити розрахунки за умови $\varepsilon = 0$ та певних значень коефіцієнтів апроксимації a_0 та a_1 рівняння (1.13), які визначені вище.

Ці розрахунки дають змогу оцінити вплив залежності питомої теплоємності від температури нагрівання заготовки за заданих умов;

в) зробити розрахунки за умови $\varepsilon \neq 0$ (вибрати значення в інтервалі 0,5 – 0,8). Величини коефіцієнтів a_0 та a_1 , як в п. б).

Ці розрахунки дають змогу визначити вплив теплопередачі випромінюванням на швидкість нагрівання заготовки за умови урахування залежності питомої теплоємності від температури.

5. Побудувати графіки отриманих результатів розрахунків зміни температури в процесі нагрівання.

6. Проаналізувати отримані результати та сформулювати висновки по роботі.

7. Оформити звіт.

1.6. Контрольні запитання

1. Яку модель називають математичною моделлю із зосередженими параметрами?

2. Які припущення приймаються під час побудови математичної моделі нагрівання металевої заготовки?

3. Що являє собою апроксимація?

4. Які існують механізми передачі тепла і якими законами вони описуються?

5. Що являє собою задача Коші і який сенс має додаткова умова?

6. Що являє собою геометричний показник виробу?

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

8. Від чого залежить точність розрахунків методом Ейлера під час розв'язку звичайних диференціальних рівнянь першого порядку?

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 2. МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ ТА БАГАТОКРИТЕРІАЛЬНА ОПТИМІЗАЦІЯ МЕТОДОМ ПОСЛІДОВНИХ ПОСТУПОК

Мета роботи: освоєння багатовимірного методу найменших квадратів для створення математичних моделей на базі експериментальних даних; опанування методики багатокритеріальної оптимізації (БКО) з реалізацією її у вигляді комп'ютерних програм визначення технологічних параметрів для отримання матеріалів із заданими властивостями.

2.1. Загальний алгоритм методу найменших квадратів

У практичній діяльності матеріалознавців часто виникає необхідність удосконалення наявних та розроблення 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. У 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). Фактично побудова моделі є апроксимацією експериментальних даних відповідними математичними функціями. Основна ідея МНК полягає в мінімізації суми квадратів відхилень апроксимувальної залежності від експериментально визначених точок (принцип Лежандра). Метод найменших квадратів дає змогу реалізувати апроксимацію даних експерименту одновимірними і багатовимірними, як лінійними, так і нелінійними функціями.

Розглянемо загальний алгоритм цього методу для випадку апроксимації двовимірною функцією. Нехай у ході експерименту отримано дані, які записано у формульному вигляді таблиці 2.1, яка складається із N точок:

$$(x_i, y_i), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.1)$$

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

$$\varphi(x) = c_0 \cdot \varphi_0(x) + c_1 \cdot \varphi_1(x) + c_2 \cdot \varphi_2(x) + \dots + c_m \cdot \varphi_m(x), \quad (2.2)$$

де $c_0, c_1, \dots, c_m$ – коефіцієнти;

$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ – деякі базисні функції.

На даному етапі вигляд базисних функцій визначати не будемо. Для того, щоб вираз (2.2) дійсно описував табл. 2.1, потрібно визначити коефіцієнти $c_0, c_1, \dots, c_m$. Для цього запишемо принцип Лежандра у вигляді математичного співвідношення:

$$Q = \sum_{i=1}^N [\varphi(x_i) - y_i]^2 \rightarrow \min, \quad (2.3)$$

де Q – сума квадратів відхилень значень апроксимувальної функції $\varphi(x_i)$ від ординат y_i точок табл. 2.1.

Підставляючи вираз (2.2) у формулу для визначення суми квадратів відхилень (2.3), отримуємо:

$$Q = \sum_{i=1}^N [c_0 \cdot \varphi_0(x_i) + c_1 \cdot \varphi_1(x_i) + c_2 \cdot \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \cdot \varphi_m(x_i) - y_i]^2 \rightarrow \min. \quad (2.4)$$

Базисні функції $\varphi_j(x_i)$ (де $j = 0, 1, 2, \dots, N$) у виразі (2.4) є константами, адже їх аргументи – це абсциси x_i точок із табл. 2.1, а функція фіксованого аргумента 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 апроксимувальної 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:

$$Q = Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m) \rightarrow \min. \quad (2.5)$$

Задача (2.5) є класичною, яка досліджується в теорії оптимізації. Умовою екстремуму (максимуму або мінімуму) функції багатьох змінних в даній точці (така точка називається **стаціонарною**) є рівність нулю її градієнта

в цій точці. Слід нагадати, що **градієнт** – це вектор, який направлено в бік максимального зростання функції, компонентами якого є частинні похідні:

$$\vec{\nabla}y(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{\partial y}{\partial x_1} \vec{i}_1 + \frac{\partial y}{\partial x_2} \vec{i}_2 + \dots + \frac{\partial y}{\partial x_k} \vec{i}_k, \quad (2.6)$$

де $\frac{\partial y}{\partial x_j}$ – частинні похідні;

$\vec{i}_j$ – одиничні вектори k -вимірному простору (орти), які задають напрямки градієнта.

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

$$\vec{\nabla}Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m) = 0. \quad (2.7)$$

Нагадаємо, що вектор є нульовим за умови, коли всі його компоненти дорівнюють нулю. Тому рівняння (2.7), яке записано в операторному вигляді, розпадається на систему рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial c_0} = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_1} = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_2} = 0, \\ \dots\dots\dots \\ \frac{\partial Q}{\partial c_m} \end{cases}$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial c_0} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_0(x_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial c_1} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_1(x_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial c_2} &= 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_2(x_i) = 0 \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (2.9)$$

Ця розширена матриця (2.12) 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 під час формування матриці);
- вона позитивно визначена, тобто під час розв’язування 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, наявністю асимптотики та іншою апіорною інформацією. Наприклад, якщо досліджується процес, який самостійно розвивається (дифузія, теплопередача), то як базисні можна вибирати експоненціальні функції. В разі дослідження коливальних систем бажано користуватися періодичними функціями (синуси, косинуси). А загалом на вибір апроксимувальних 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, ступеневою функцією буде кращою, ніж експонентною. Часто можна застосувати обидві функції, а наближення буде кращим там, де залишки (тобто різниці між експериментальними точками y_i та розрахованими з використанням побудованих моделей $\tilde{y}_i$, 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 у кожній із вузлових точок табл. 2.1 приблизно дорівнює похибці визначення експериментальних даних δ :

$$\sqrt{Q} \approx \delta. \quad (2.13)$$

Іноді апроксимацію складною функцією типу (2.2) реалізують за допомогою покрокової процедури. Спочатку функцію (2.2) складають з однієї

або двох базисних функцій. Потім розраховують коефіцієнти c_j , визначають величину Q і якщо не виконується умова:

$$\sqrt{Q} < \delta, \quad (2.14)$$

то розширюють базис функції (2.2), доповнюючи її ще однією $\phi_j(x)$ і повторюють розрахунки. Базис розширюють, доки не виконається умова (2.13). Щоб система (2.11) мала єдиний розв'язок, кількість базисних функцій m має бути пов'язаною із кількістю точок N із табл. 2.1 співвідношенням:

$$N \geq m+1, \quad (2.15)$$

Розв'язувати систему (2.11) можна будь-яким способом, наприклад методом Гаусса 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 термочасового оброблення. Такий випадок експерименту можна представити схемою, поданою на рис. 2.1.

На систему S (рис. 2.1) 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.

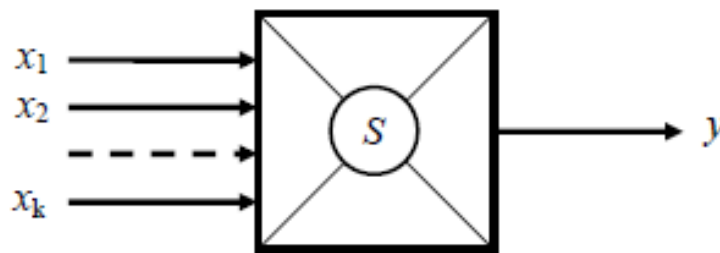


Рис. 2.1. Схематичне зображення багатофакторного експерименту, коли досліджувана система є функцією багатьох змінних $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$
 $x_1, x_2, \dots, x_k$ – k - факторів, що впливають на систему;
 y – відгук системи; S – система, яку досліджують

Для апроксимації результатів багатофакторних експериментів також можна застосувати принцип Лежандра, тобто реалізувати метод найменших квадратів. У цьому випадку потрібно застосувати 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 багатофакторної апроксимації, наприклад, мають вигляд:

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = x_0 \\ \varphi_1(x) = x_1 \\ \varphi_2(x) = x_2 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \\ \varphi_k(x) = x_k \end{cases}, \quad (2.16)$$

У цьому випадку загальна апроксимувальна функція набуває вигляду:

$$\varphi(x) = c_0 \cdot x_0 + c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 + c_3 \cdot x_3 + \dots c_k \cdot x_k. \quad (2.17)$$

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

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N x_{0i}^2 & \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{0i} & \sum_{i=1}^N x_{2i} x_{0i} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki} x_{0i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{0i} \\ \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{1i} & \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^N x_{2i} x_{1i} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki} x_{1i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{2i} & \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{2i} & \sum_{i=1}^N x_{2i}^2 & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki} x_{2i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{2i} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ki} & \sum_{i=1}^N x_{1i} x_{ki} & \sum_{i=1}^N x_{2i} x_{ki} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki}^2 & \sum_{i=1}^N y_i x_{ki} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Розв'язок системи, яка описується розширеною матрицею (2.18), також знаходять за допомогою відповідних методів.

Комп'ютерна програма «МНК», яка пропонується для виконання цього практикуму, реалізує багатовимірний метод найменших квадратів.

У процесі оброблення експериментальних даних іноді виникають проблеми, пов'язані, перш за все, із відносно великою експериментальною похибкою деяких результатів. У разі застосування «МНК» такі точки чітко виділяються в «таблиці залишків» (це виражена у відсотках різниця між експериментальними точками та їх апроксимованими величинами). У процесі

обчислень 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 (2.15)). Така ситуація характерна для багатфакторних експериментів. У цьому випадку під час розроблення загального плану експерименту бажано застосовувати методологію **«активного експерименту»**, з якою можна ознайомитись у відповідній літературі.

Адекватність побудованих таким чином математичних моделей частіше за все доводять, аналізуючи таблицю залишків, і порівнюють похибку апроксимації з похибкою реального експерименту, за результатами якого ці моделі будувались. За наявності результатів дублів експериментальних точок (тобто повторних вимірювань у них), можна оцінити випадкову похибку експерименту та для доведення адекватності побудованої моделі використати статистичний критерій Фішера (див. відповідну літературу).

2.2. Задачі теорії оптимізації

Розроблення математичних моделей, які апроксимують експериментальні дані, як правило, мають мету покращити ту чи іншу технологію. Для цього використовуються методи теорії оптимізації. Теорія оптимізації визначається як логіко-математичні методи, які дають змогу уникнути загального перебору.

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 із 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 за 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 на розтягування (σ_B), а як характеристику пластичності – відносне видовження (δ).

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

$$\sigma_B = f_1(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (2.19)$$

$$\delta = f_2(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (2.20)$$

$$x_{1min} \leq x_1 \leq x_{1max}, \quad (2.21)$$

$$x_{2min} \leq x_2 \leq x_{2max}, \quad (2.22)$$

$$x_{kmin} \leq x_k \leq x_{kmax}. \quad (2.23)$$

де $x_1, x_2, \dots, x_k$ – фактори, які впливають на показники σ_B та δ і є параметрами математичних моделей;

x_{jmin} та x_{jmax} – мінімальні та максимальні значення, які можуть приймати фактори.

Вирази (2.19) та (2.20) являють собою цільові функції, (2.21), (2.22) і (2.23) – це обмеження, які визначають межі факторного простору. Припустимо, що потрібно максимізувати міцність або пластичність. Тобто потрібно знайти таке поєднання значень факторів, за яких σ_B або δ приймають максимальні значення. В такому випадку математичне формулювання задачі оптимізації включає в себе одну із цільових функцій та додаткові умови (2.21) – (2.23). Розв'язок такої задачі не має значних ускладнень. У 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**» (БКО).

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 у даній галузі знань, наприклад, матеріалознавець, ливарник тощо. Пояснимо роль ОПР на прикладі двох методів, які часто застосовують під час вирішення таких задач.

2.3. Метод зведення двох критеріїв до одного (БКО-1)

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 із критеріїв. Тобто ОПР повинен вибрати, з міркувань конкретної технології, числа α_1 та α_2 , а потім – побудувати єдину цільову функцію:

$$F = \alpha_1 f_1(x_1, x_2, \dots, x_k) + \alpha_2 f_2(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (2.24)$$

де $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

Якщо $\alpha_2 = 0$, то враховується тільки перша частина цільової функції (2.24), а друга частина цільової функції (2.24) – 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 під час вирішення 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 значною мірою ускладнюється. Сума всіх чисел α_j має дорівнювати одиниці, а величини часток від одиниці, які вони мають приймати, не зовсім очевидні.

2.4. Метод послідовних поступок (БКО-2)

Нехай існує задача (2.19) – (2.23). Зважаючи на те, що одночасно неможливо отримати обидва максимуми функцій (2.19) та (2.20), 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 мають бути не нижчими від деякої заданої ОПР величини. Тоді задача перетворюється на задачу одновимірної оптимізації, яка включає лише одну цільову функцію (2.19) з іще однією додатковою умовою:

$$\begin{cases} \sigma_b = f_1(x_1, x_2, \dots, x_k), \\ \delta \geq \delta_0, \\ x_{1min} \leq x_1 \leq x_{1max} \\ x_{2min} \leq x_2 \leq x_{2max} \\ \dots \dots \dots \dots \dots \\ x_{kmin} \leq x_k \leq x_{kmax} \end{cases} \quad (2.25)$$

Нехай після виконання звичайної задачі одновимірної оптимізації за наявності обмежень знайдено максимум за певних значень параметрів $x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*$. Далі слід перевірити виконання додаткової умови (в нашому випадку – накладеної на пластичність $\delta \geq \delta_0$). Для цього знайдені значення параметрів моделі $x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*$ підставляють у рівняння (2.20) і розраховують величину δ . Якщо нерівність $\delta \geq \delta_0$ виконується, то розв’язок задачі (2.25) знайдено. Це означає, що знайдено і розв’язок задачі (2.19) – (2.23).

Якщо нерівність $\delta \geq \delta_0$ не виконується, то ОПР робить поступку. Він погоджується, щоб перша властивість була не максимальною, а відрізнялась би 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_0 . Нарешті остаточні результати оптимізації слід проаналізувати. В разі їх прийнятності проблема вважається вирішеною. За незадовільних результатів 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 має співпадати із 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 за багатокритеріальної оптимізації, крім формалізованого алгоритму, постають такі поняття, як «*досвід*» та «*перевага*». Це включення «людського фактора», яке тільки на перший погляд видається дивним, але є цілком доречним і природним.

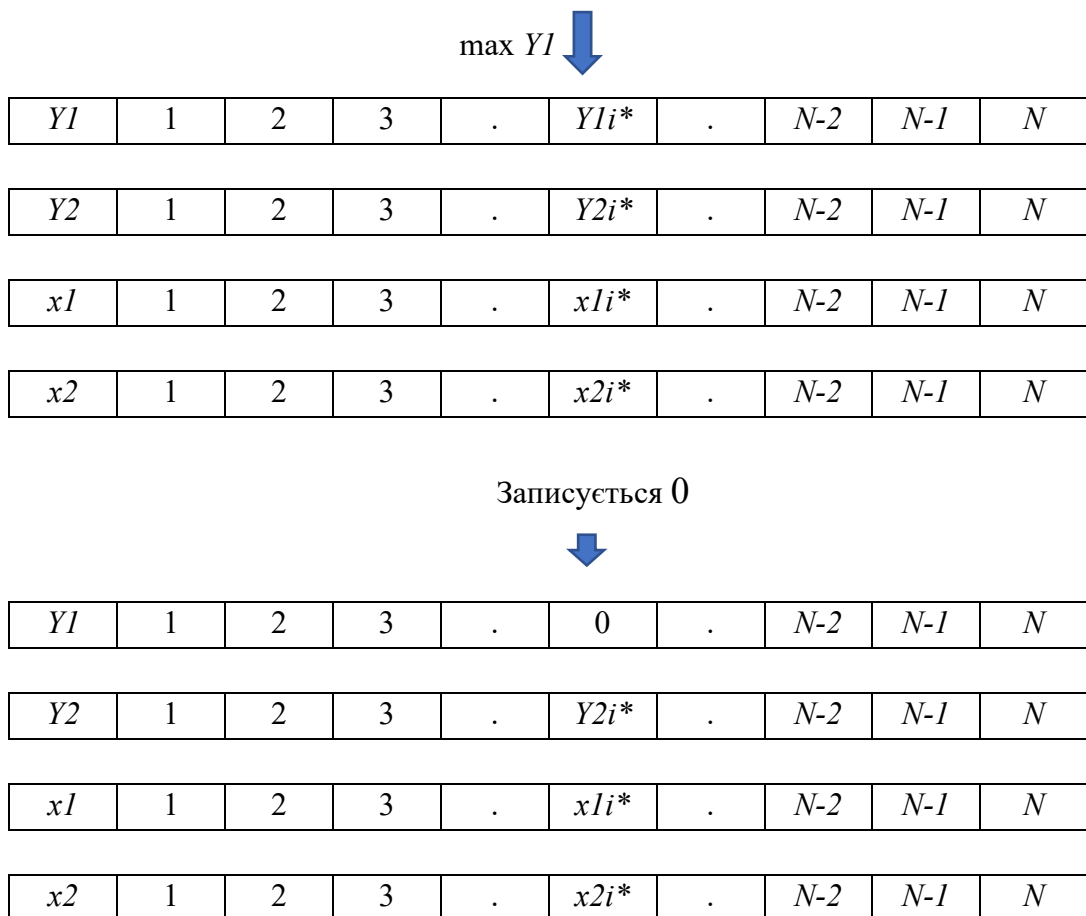


Рис. 2.2. Реалізація методу поступок багатокритеріальної оптимізації:
а – умова $Y_2 \geq Y_{20}$ виконується, роз’вязок знайдено; б – умова $Y_2 \geq Y_{20}$ не виконується, в комірку записується 0 і пошук продовжується

За наявності трьох і більше цільових функцій, кількість розрахунків у ході багатокритеріальної оптимізації значно зростає. Тому розрахунки бажано здійснювати із застосуванням комп’ютера. Враховуючи можливості сучасних комп’ютерів, під час вирішення задач багатокритеріальної оптимізації можна застосовувати прості методи, які в теорії вважаються малоефективними,

наприклад, метод загального пошуку. Фактично цей метод являє собою майже повний перебір різних варіантів. Наприклад, відгук σ_v визначено як головний, а для другого – задано умову $\delta \geq \delta_0$. Програмними засобами неважко організувати розрахунок значень цільових функцій для σ_v і δ за почергової зміни значень факторів $x_1, x_2, \dots, x_k$ із заданими кроками по кожному з них (див. рис. 2.2). Крок зміни кожного із факторів задається точністю їх визначення в експерименті. Розраховані значення відгуків і задані значення факторів записують у відповідні масиви розмірністю N (σ_v на рис. 2.2 позначено як Y_1 , а δ як Y_2). Після цього визначають максимальне значення головного відгуку $\sigma_{v \max}$ (тобто Y_1). За індексом елемента масиву i^* для $\sigma_{v \max}$ перевіряють додаткову умову для другого відгуку (який вже розраховано) і якщо вона виконується (тобто $\delta \geq \delta_0$), розрахунки припиняють (рис. 2.2, а).

Якщо додаткова умова не виконується, в комірку масиву головного відгуку зі знайденим максимальним значенням $\sigma_{v \max}$ записуються нуль або якесь від'ємне число і знову знаходять найбільше значення σ_v (рис. 2.2, б). Так повторюють, доки не буде знайдено максимальне значення σ_v , за якого виконується умова для другого відгуку ($\delta \geq \delta_0$) і розрахунки також припиняють.

Якщо такого поєднання факторів не знайдено, слід переглянути додаткову умову у бік її послаблення і повторити розрахунки.

Алгоритм цього варіанту методу багатокритеріальної оптимізації представлено на рис. 2.3. У блоці 1 задано межі зміни факторів x_1 та x_2 , які визначено в задачі (2.19) – (2.23). Умова $\delta \geq \delta_0$ задається у блоці 2. Блок 3 реалізує перебір значень факторів із заданими кроками та обчислення Y_1 та Y_2 . У блоці 4 підготовлюється лічильник, який використовується для закінчення роботи програми у випадку невдалого пошуку. Далі виконується пошук максимального значення Y_1 і фіксація номера комірки масиву, в якій воно знаходиться (блок 5). У наступному блоці 6 перевіряється умова для Y_2 і в разі її виконання виводяться результати розрахунків (блок 7) та завершується робота програми. Якщо умова не виконується, то в комірку Y_1 з максимальним значенням записується 0 (блок 8) і лічильник k збільшується на 1. У блоці перевіряється стан лічильника k ($k = N?$) і якщо умова не виконується, розрахунки повертаються в блок 5. Виконання умови $k = N$ означає, що всі комірки було переглянуто, потрібної точки не знайдено і в блоці 10 про це формується повідомлення. Далі робота програми завершується. Текст програми на мові *QBasic* представлено в Додатку Г.

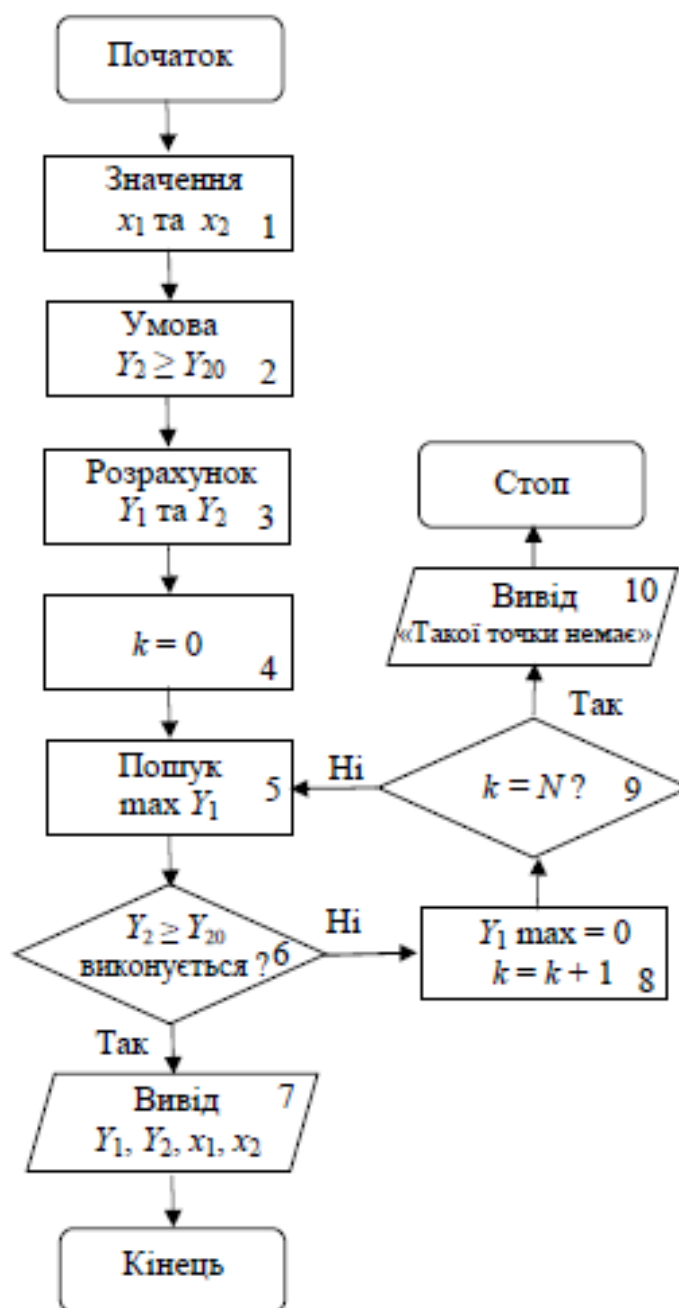


Рис. 2.3. Алгоритм реалізації багатокритеріальної оптимізації (БКО-2)

Метод загального пошуку можна дещо модифікувати за допомогою більш раціонального вибору кроків розрахунку. Для цього величини кроків зміни значень факторів вибирають у 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.

Розглянуті варіанти розрахунків цільових функцій для зазначених границь зміни факторів являють собою фактично перебір. Він є доцільним за

умови незначних розмірів області зміни факторів (її часто називають простором проектування). У випадку великого розміру простору проектування можна використовувати метод випадкового пошуку, коли для вибору значень факторів застосовується генератор випадкових чисел.

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.

Окрім розглянутої задачі багатокритеріальної оптимізації (2.19) – (2.23), у практиці дослідника часто виникає необхідність розрахувати склад сплаву, який би забезпечував певний діапазон властивостей, використовуючи математичні моделі, побудовані за результатами проведених експериментів (БКО-3). В такому випадку задача багатокритеріальної оптимізації набуває дещо іншого вигляду. Окрім цільових функцій (2.19) та (2.20) та інтервалів зміни факторів (2.21) – (2.23), додаються умови на відгуки. Всі ці умови знов таки формулює ОПР, виходячи з поставлених задач конкретної розробки. Такий варіант формулювання задачі багатокритеріальної оптимізації має вигляд:

$$Y_1 = f_1(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (2.26)$$

$$Y_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (2.27)$$

$$Y_{1min} \leq Y_1 \leq Y_{1max}, \quad (2.28)$$

$$Y_{2min} \leq Y_2 \leq Y_{2max}, \quad (2.29)$$

$$x_{1min} \leq x_1 \leq x_{1max}, \quad (2.30)$$

$$x_{2min} \leq x_2 \leq x_{2max}, \quad (2.31)$$

$$x_{kmin} \leq x_k \leq x_{kmax}. \quad (2.32)$$

Для розв'язку такої задачі використання класичних методів оптимізації не потрібно. Використовується розрахунок математичних моделей (2.26) та (2.27) у заданих областях зміни факторів (2.30) – (2.32) та перевірка умов (2.28) та (2.29). Алгоритм цієї програми наведено на рис. 2.4.

У блоці 1 задаються області зміни факторів відповідно до умов (2.30) – (2.32), а у блоці 2 умови, які накладаються на відгуки Y_1 та Y_2 (2.28) та (2.29). Розрахунок Y_1 та Y_2 з допомогою математичних моделей реалізується у блоці 3. Реалізувати цей блок зручно, використовуючи оператор циклу з

лічильником (FOR...). Умови, які задано у блоці 2, послідовно перевіряються у блоках 4 та 5. У разі їх виконання виводяться результати розрахунків (блок 6). Якщо будь-яка з умов (2.28) та (2.29) не виконується, виконання програми повертається до блоку 3. Блок 7 призначено для перевірки закінчення розрахунків. Даний алгоритм реалізує саме задачу (2.26) – (2.32) для двох цільових функцій. У разі наявності більшої їх кількості збільшиться кількість блоків перевірки відповідних умов.

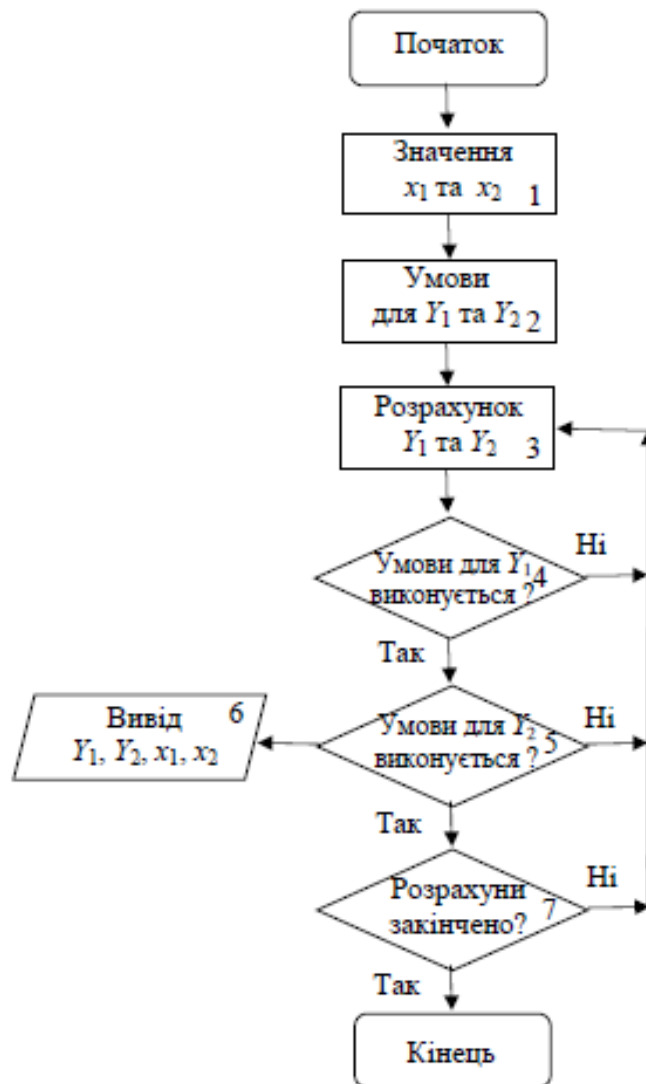


Рис. 2.4. Алгоритм реалізації другого варіанту багатокритеріальної оптимізації (БКО-3)

За умови реалізації цього алгоритму на практиці часто відбувається так, що з'являється багато варіантів оптимального розв'язку задачі (2.26) – (2.32), і це не зручно. В такому випадку можна дещо зменшити задані інтервали для Y_1 та Y_2 в умовах (2.28) – (2.29).

2.5. 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. Дані для розрахунків наведено в Додатку В. Для проведення розрахунків потрібно:

1. Запустити програму «MNK» на виконання.
2. Ввести дані, варіанти яких наведено в Додатку Г, в таблицю, натиснувши кнопку «Таблица» (рис. 2.5). 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 «... .mnk». За необхідності працювати із вже існуючим файлом, потрібно натиснути «Файл» та відкрити його «Открыть», щоб вибрати потрібний файл.
3. Перевести програму в режим обчислень коефіцієнтів кореляції, натиснувши клавішу «Расчет $R(x, y)$ » (рис. 2.6). 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.
4. Побудувати математичну модель (рис. 2.7), перевівши програму в режим обчислень за допомогою клавіши «Расчет». У вікно «Порог $[0 \dots 1]$ » ввести приблизне середнє значення коефіцієнтів кореляції. У цьому вікні можна залишити нуль. Введена величина впливає на запропонований програмою вигляд математичної моделі. Потім потрібно натиснути клавішу розрахунку «Рассчитать». У відповідному вікні з'явиться формула математичної моделі, яку, за необхідності, можна коригувати (підказку для коригування розташовано над вікном). За необхідності, змінити вигляд математичної моделі та очистити вікно із формулою можна натиснувши клавішу «Очистить». Після натискання кнопки «Рассчитать коэффициенты» відбувається розрахунок коефіцієнтів моделі, значення яких з'являється у вікні знизу.

Вікно праворуч дає інформацію стосовно адекватності моделі. У першій колонці зазначеного вікна показано номер експериментальної точки з таблиці даних. У другій – введені в таблицю значення відгуку ($Y_{\text{експ}}$), а в третій – апроксимовані за допомогою побудованої математичної моделі значення відгуку ($Y_{\text{розн}}$).

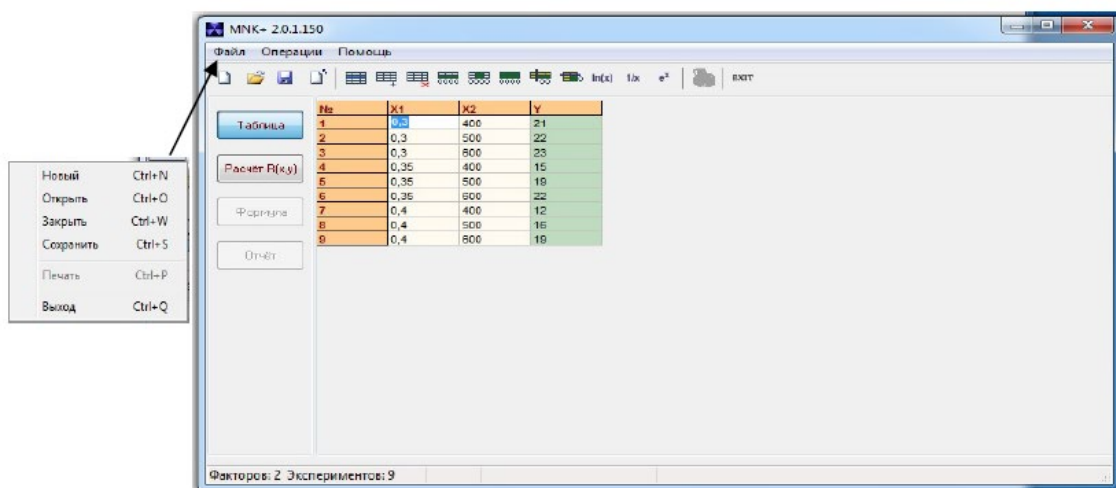


Рис. 2.5. Интерфейс программы «МНК», який відповідає початку роботи

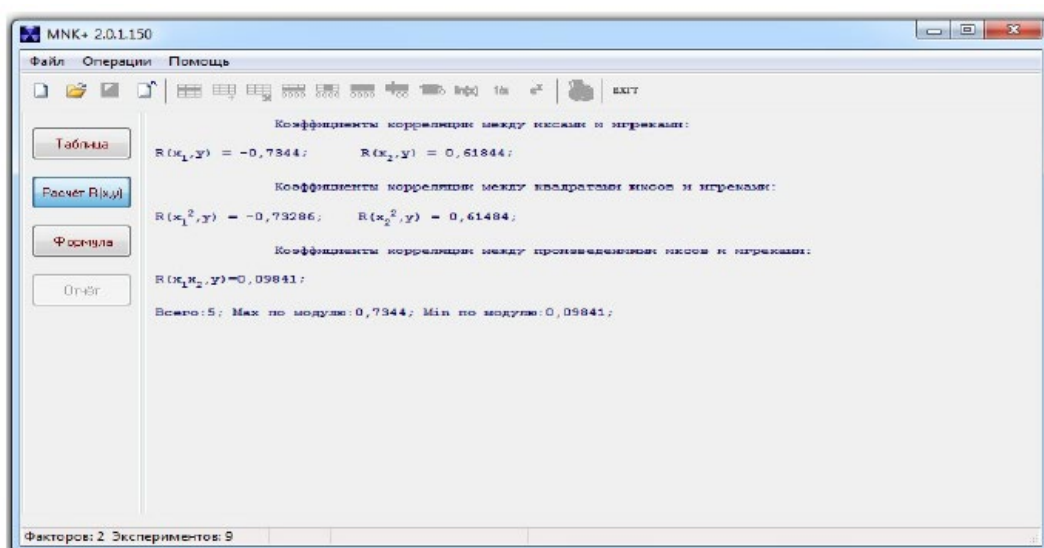


Рис. 2.6. Интерфейс программы «МНК», який відповідає розрахунку коефіцієнтів кореляції

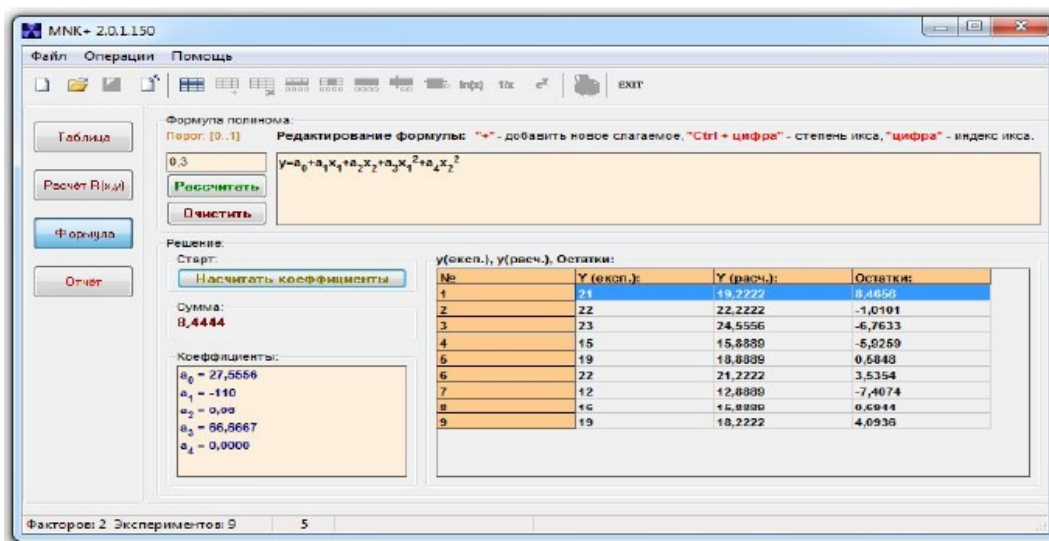


Рис. 2.7. Интерфейс программы «МНК», який відповідає розрахунку коефіцієнтів моделі

В останній колонці наведено таблицю залишків, які виражено у відсотках ($\frac{Y_{\text{експ}} - Y_{\text{розрах}}}{Y_{\text{експ}}} \cdot 100 \%$). Якщо похибка апроксимації приблизно дорівнює або менша від похибки експерименту, то побудована математична модель вважається адекватною і розрахунки закінчуються.

У 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 під час введення у формулу моделі нового члена «Сумма» суттєво зменшується, то крок вважається вдалим. Якщо ні, то даний фактор або ефект взаємодії краще не враховувати.

У разі наявності в результатах експерименту збійних точок або в інших випадках введену таблицю експериментальних даних можна коригувати. Після натискання кнопки «Таблиця» зверху на інтерфейсі з'являється рядок із відповідними підказками.

5. Вивести результати розрахунків на друк за допомогою кнопки «Отчет» (рис. 2.8). Натиснувши на клавішу  з наступного меню, отримати результати обчислень на папері (якщо принтер підключено до комп'ютера).

6. Закінчити обчислення і вийти з програми, вибравши команду «Enter» на інтерфейсі виведення результатів або «Выход» в загальному меню (див. рис. 2.5).

7. Провести багатокритеріальну оптимізацію за експериментальними даними, наданими викладачем та наведеними в Додатку Г. Для цього:

- побудувати математичні моделі властивостей матеріалів, використовуючи комп'ютерну програму «МНК», зазначену вище;
- сформулювати задачі багатокритеріальної оптимізації БКО-2 та БКО-3;
- визначити кроки зміни факторів для розрахунку значень цільових функцій, виходячи з потрібної точності (встановлюється ОПР, у даному випадку – студентом);
- вирішити перший варіант задачі багатокритеріальної оптимізації, використовуючи комп'ютерну програму, яка реалізує методи послідовних поступок і загального пошуку (приклад програми на мові «QBasic» наведено в

Додатку Д, програма № 1). За бажанням студента програму можна переписати в іншій мові програмування;

– вирішити другий варіант задачі багатокритеріальної оптимізації використовуючи комп'ютерну програму № 2 (Додаток Д).

8. Сформулювати висновки по роботі.

9. Оформити звіт.

2.6. 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. Яким чином можна довести адекватність математичної моделі, побудованої за експериментальними даними?
9. Що мають на увазі під терміном «багатокритеріальна оптимізація»?
10. В чому полягає особливість розв'язку задачі «багатокритеріальної оптимізації»?
11. Які логічні підстави залучення ОПР?
12. У чому полягає метод зведення багатьох критеріїв до одного?
13. У чому полягає метод послідовних поступок?
14. У чому полягає метод загального пошуку?

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 3.

КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВПЛИВУ ШВИДКОСТІ ОХОЛОДЖЕННЯ НА УТВОРЕННЯ ОСЕРЕДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ В ПРОЦЕСІ ГОМОГЕННОЇ КРИСТАЛІЗАЦІЇ

Мета роботи: опанувати методику підготовки імітаційної моделі кристалізації металів «*KRISTAL-1*» для проведення комп'ютерних експериментів та дослідити вплив швидкості охолодження на утворення осередків твердої фази та структуру твердого металу під час гомогенної кристалізації за допомогою комп'ютерної моделі «*KRISTAL-1*».

3.1. Теоретичні відомості

Кристалізація – це перехід металу із 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 за даних тиску і температури.

У разі зміни 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 у цьому стані має менший запас вільної енергії. За нижчих температур менший запас вільної енергії має метал у твердому стані. За певної температури величини вільних енергій твердого та рідкого станів рівні. Тому метал як завгодно довго може перебувати в рідкому, твердому або двофазному твердо-рідкому станах. У цих умовах перехід із 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 за умови охолодження рідини нижче $T_{кр}$. Температура, за якої фактично починається процес кристалізації, називається фактичною температурою кристалізації ($T_{cr}(t)$). Охолодження розплаву нижче теоретичної температури кристалізації називається переохолодженням. Його величину оцінюють ступенем переохолодження, який є різницею між теоретичною і фактичною температурами кристалізації ($\Delta T = T_{кр} - T_{cr}(t)$).

Ступінь переохолодження ΔT залежить від швидкості охолодження розплаву. Із збільшенням швидкості охолодження зменшується фактична температура кристалізації $T_{cr}(t)$ 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 ($n_{ц}$), які утворюються в одиницю часу в одиниці об'єму, і швидкістю росту кристалів ($v_{ц}$). Ці параметри залежать від ступеню переохолодження, а отже – від швидкості охолодження під час кристалізації.

Залежність $n_{ц}$ і $v_{ц}$ від переохолодження нелінійна та має максимум. Це можна пояснити таким чином. За теоретичної температури кристалізації значення $n_{ц}$ і $v_{ц}$ дорівнюють 0 і кристалізація відбуватися не може. За умови збільшення ступеню переохолодження значення $n_{ц}$ і $v_{ц}$ збільшуються і кристалізація відбувається швидко. Це пояснюється тим, що за відносно високих температур, близьких до $T_{кр}$, рухливість атомів велика. Висока рухливість атомів підвищує ймовірність їх взаємодії. За певних ступенів переохолодження значення $n_{ц}$ і $v_{ц}$ досягають максимуму, після чого їх величини зменшуються через зменшення рухливості атомів за низьких температур.

Розміри зерен, які утворилися в ході кристалізації, залежать від співвідношення між величинами $n_{ц}$ і $v_{ц}$, тобто визначаються ступенем переохолодження (швидкістю охолодження металу під час кристалізації). За малих ступенів переохолодження (малій швидкості охолодження) утворюється невелика кількість центрів кристалізації, які зростають з невеликою швидкістю. Тому після закінчення кристалізації структура металу буде крупнозернистою. Навпаки, за великих ступенів переохолодження, $n_{ц}$ велике, а $v_{ц}$ також велика. Проте саме велика кількість центрів кристалізації призводить до того, що структура металу виходить дрібнозернистою. Якщо переохолодження настільки велике, що значення $n_{ц}$ і $v_{ц}$ близькі до нуля, то кристалізація може не відбуватися. При цьому може утворитись тверде тіло, яке має не кристалічну будову з «правильним» розташуванням атомів, а аморфне – з хаотичним розташуванням атомів – «тверда рідина». Аморфний стан характерний для неметалевих матеріалів (скло, полімери). Для отримання аморфного стану у металевих матеріалів потрібна дуже велика швидкість охолодження ($10^6 - 10^7$ K/c).

3.2. Імітаційне моделювання

За результатами аналізу процесу формування полікристалічної структури металів можна стверджувати про неможливість математичного формулювання задачі, яка могла би 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 кристалів, що зростають. 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 кристалів, фільтрацію рідкої фази, тобто ефекти, які мають місце на завершальних етапах процесу. За бажання таку математичну систему сформулювати можна, але розв'язати її практично неможливо.

Під час дослідження 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». У системному аналізі впроваджено порівняно новий метод моделювання, який отримав назву імітаційне моделювання (від англійського «*simulation modeling*»). 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: математична модель – це рівняння або система рівнянь, а імітаційна модель – це алгоритм. Цю різницю також можна спостерігати, виділивши основні етапи її побудови. На першому етапі формують головні 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 векторів стану і процеси, що їх перетворюють.

На третьому етапі формулюють 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 тощо). Саме блоковий принцип дає можливість під час побудови 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 під час дослідження 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 таку близькість обумовлено 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, які описують простими математичними співвідношеннями.

У комп'ютерних практикумах № 3 – № 5 використовується імітаційна модель кристалізації чистого металу, а у практикумі № 6 – імітаційна модель подвійного сплаву. Ці моделі дають змогу досліджувати утворення структури матеріалу, застосовуючи методологію імітаційного моделювання з використанням клітинних автоматів, які описуються в синергетиці. В процесі їх створення 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 спрогнозувати 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 у 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 (комп'ютерів).

Під час дослідження кристалізації як у теоретичному плані, так і для розроблення технологічних заходів, великий науковий і практичний інтерес являє саме визначення оптимальних шляхів управління зростанням кристалів. Таку можливість надає моделювання структуроутворення під час кристалізації і прогнозування 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 в запропонованих моделях еволюція клітинного автомату «підпорядкована» класичним тепловим законам.

3.3. Імітаційна модель кристалізації

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

(рис. 3.1). Хвиля перемикавання в ланцюзі зв'язаних між собою бістабільних елементів кліткового автомату описується рівнянням:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a\Delta U(r, t) + F(r, t), \quad (3.1)$$

де $U(r, t)$ та $F(r, t)$ – деякі потенціальні функції;

a – коефіцієнт;

r – просторова координата;

t – час.

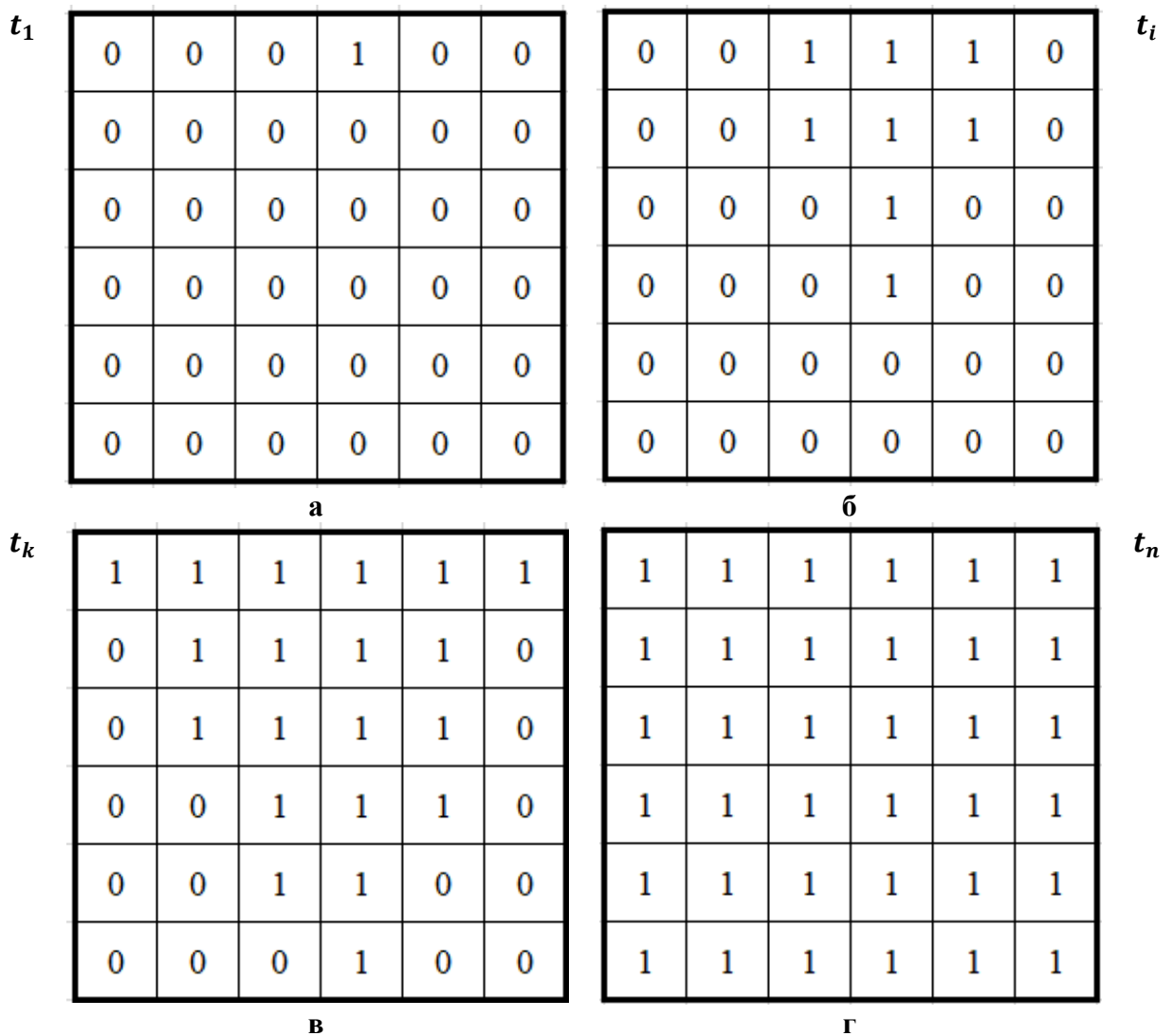


Рис. 3.1. Схема поширення хвилі переключень у двовимірному активному середовищі, яке складається із бістабільних елементів:

а, б, в, г – стани кліткового автомата у різні моменти часу t_1, t_i, t_k, t_n

Але таке ж рівняння лежить в основі багатьох математичних моделей кристалізації. Якщо функцію $U(r, t)$ замінити температурою системи $T(r, t)$, то воно стає рівнянням теплопровідності Фур'є. Коефіцієнт a в цьому випадку

набуває змісту коефіцієнта температуропровідності, а функція $F(r, t)$ описує виділення теплоти кристалізації.

Розглядаючи для побудови імітаційної моделі кристалізацію чистого металу або бінарного сплаву, можна виділити основні макрофізичні процеси, які визначають її перебіг. По-перше, це теплопередача, яка відбувається в об'ємі розплаву під впливом зовнішніх факторів. Під цим мається на увазі тепловий потік з поверхні форми з розплавом, спрямований від нагрітого тіла у навколишнє середовище. Саме він зумовлює певну швидкість охолодження в системі і температурний градієнт у ній. Можна стверджувати, що саме тепловий потік є визначальним у цьому процесі, адже одним із найважливіших параметрів під час формування структури твердого металу 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 у довільний момент часу) впродовж всього процесу. У його основу доцільно покласти рівняння теплопровідності. Під час формулювання 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 під час кристалізації сплавів 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 у просторі системи.

Кількісні значення зміни складу рідкої фази під час виділення 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 мають припускати відсутність обміну речовиною на границях системи. Нерівномірність концентрації другого компонента в рідині, обумовлена «розділовою дифузією», враховується за допомогою зміни початкових умов на 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. За його наявності з'являються умови для утворення нового кристала або зростання вже наявного. Відомо, що зростання вже існуючого кристала відбувається за менших значень переохолодження, 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 наявних кристалів за нормальним механізмом (який є характерним для кристалізації металів) бажано привнести в моделювання цих процесів елемент випадку. Тому в моделі в процесі управління клітинним автоматом застосовується генератор випадкових чисел.

Утворення твердої фази у певній точці системи супроводжується виділенням тепла кристалізації і зміною концентрації другого компонента довкола цієї точки. Ці ефекти враховують під час розрахунків температури і складу на наступному часовому кроці.

Для того, щоб імітаційна модель кристалізації відображала основні фізичні риси модельованого процесу, обрано ймовірнісний тип кліткового автомата. 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 за певного постійного переохолодження. Але в реальних умовах для більшості технологічних процесів швидкість охолодження є значною. 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, загальне тепловідведення у навколишнє середовище перевищує тепловий потік, який виникає внаслідок утворення твердої фази. Тому переохолодження 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, тобто призвести до утворення початкового кристала. 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, на наш погляд, є точкою біфуркації, тобто точкою втрати стійкості, а це явище є нелінійним.

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

- файли, в які в ході роботи програми записуються: температура в центральній точці на кожному кроці розрахунку, кількість центрів кристалізації і швидкість їх зростання, кількість твердої фази і швидкість її зростання, величина градієнта температур по перерізу системи;
- картинка, яка моделюється клітинним автоматом і являє собою вікно виведення 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 у твердому сплаві по перерізу виливка.

В обох моделях передбачено можливість визначення середнього розміру зерна у твердому металі.

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 під час розроблення нових технологій ливарного виробництва.

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

3.4. Алгоритм імітаційної моделі кристалізації

Як зазначалося, імітаційна модель кристалізації, яка відображає фізичні процеси виникнення і зростання кристалів у розплаві під впливом зовнішніх умов, являє собою певний алгоритм. Зазвичай будь-який алгоритм, призначений для проведення розрахунків, починається із введення початкових даних. У цьому 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 частинок) у розплаві; вплив (або його відсутність) стінок форми. Тому загальна блок-схема (рис. 3.2, а, б) алгоритма імітаційної моделі кристалізації бінарного сплаву починається з блока 1 (див. рис. 3.2, а), в якому здійснюється введення початкової інформації, до якої належать:

- початкова температура у середині розплаву;
- температура закінчення розрахунків;
- 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);
- тривалість 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;
- 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).

Відповідно до фізичної природи моделі, розмірність всіх вхідних даних алгоритму імітаційної моделі відповідає системі СІ.

У блоці 2 алгоритма (див. рис. 3.2, а) 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).

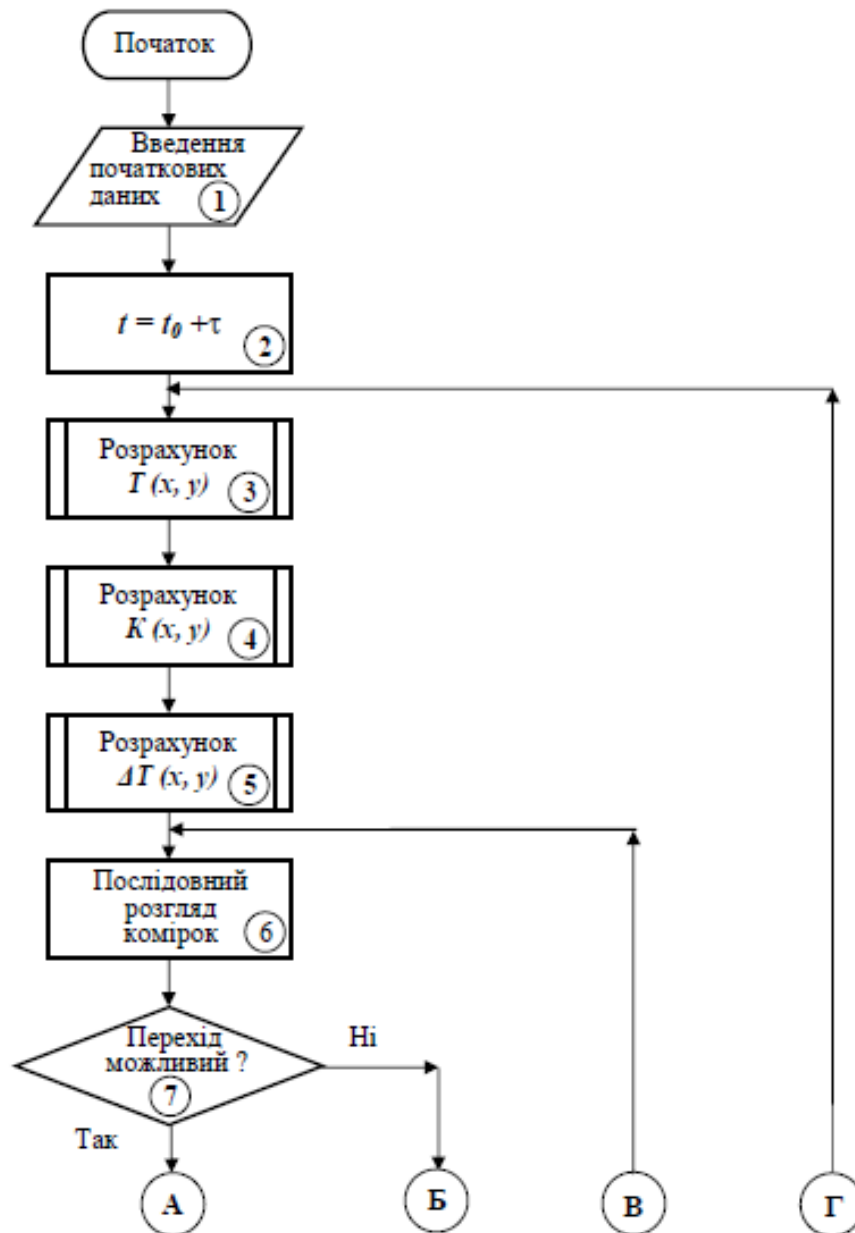


Рис. 3.2 (а). Блок-схема загального алгоритма імітаційної моделі утворення структури під час кристалізації

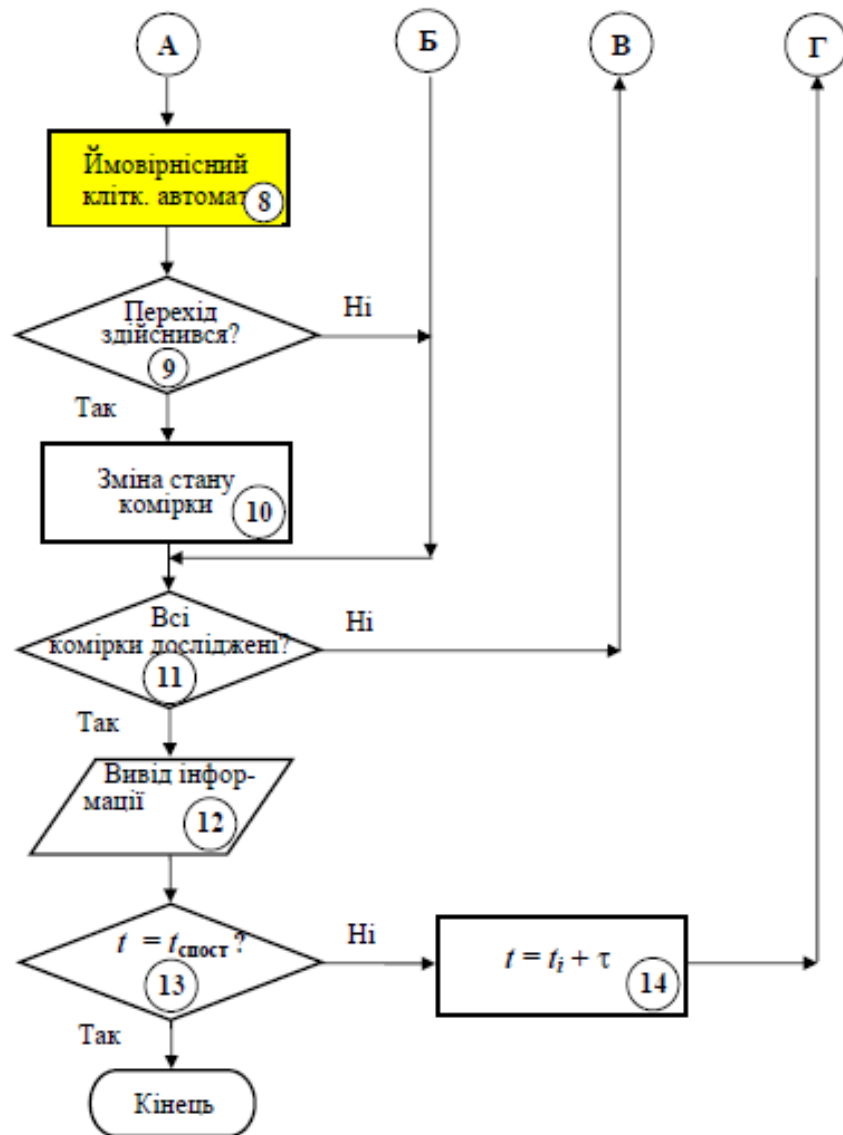


Рис. 3.2 (б). Блок-схема загального алгоритма імітаційної моделі утворення структури під час кристалізації

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

В рамках цієї моделі метал, що твердіє, розглядається як двовимірний масив, кожен з елементів якого може бути або у рідкому, або у твердому станах. Блок 6 виконує певні диспетчерські функції, тобто послідовно організовує перегляд всіх точок. За наявності переохолодження виникає можливість фазового переходу «рідина – тверде тіло». У 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).

У блоці 9 перевіряється стан комірки, яка є центральною у клітковому автоматі (блок 8), і якщо фазове перетворення здійснилось, то воно фіксується у 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, який кристалізується, а необхідні розрахункові величини заносяться у відповідні файли (блок 12). Розрахунки на даному інтервалі системного часу закінчились. 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, яку сформовано у блоці 10.

Більш детально структуру блока 8, який реалізує клітковий автомат, подано на рис. 3.3. Його робота починається з огляду найближчих сусідів комірки, в якій є переохолодження і можливе фазове перетворення (блок 8-1). Після цього приймається рішення: або може з'являтися новий центр кристалізації, або може зростати вже наявний кристал (блок 8-2). Зростання кристала відбувається за меншого переохолодження, 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 кристала. У протилежному випадку можливим є зародження нового центра кристалізації. Для підкреслення енергетичних розходжень процесів утворення і зростання кристала вводяться деякі «бар'єри», розмір яких визначається переохолодженням у даній точці.

Для визначення цих бар'єрів введено поняття максимального переохолодження для швидкості утворення центрів кристалізації (n_c) ΔT_{max2} і для швидкості зростання наявного кристала (v_k) ΔT_{max1} . Тоді залежності основних параметрів кристалізації від переохолодження ΔT , які вважаються зростаючою функцією параболічного типу, можна апроксимувати лінійними функціями. За умови $\Delta T = \Delta T_{m2}$ ймовірність появи нового центра кристалізації дорівнює одиниці. За умови $\Delta T = \Delta T_{m1}$ наявний кристал обов'язково зростає. За $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \geq \Delta T_{m1}$ ймовірність утворення центра твердої фази дорівнює нулю, але може зростати вже наявний кристал. За умови $\Delta T = 0$ фазові перетворення не відбуваються. Аналітично ймовірнісні пороги для утворення

центрів кристалізації P_2 та для зростання вже наявного кристала P_1 можна записати таким чином:

$$P_1 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m1}}, \quad (3.2)$$

$$P_2 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m2}}. \quad (3.3)$$

У 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 центра кристалізації та зростання вже наявного кристала. Тобто вони визначають частку, яку складає переохолодження в цій точці до максимально можливого, що задається як евристичний параметр моделі.

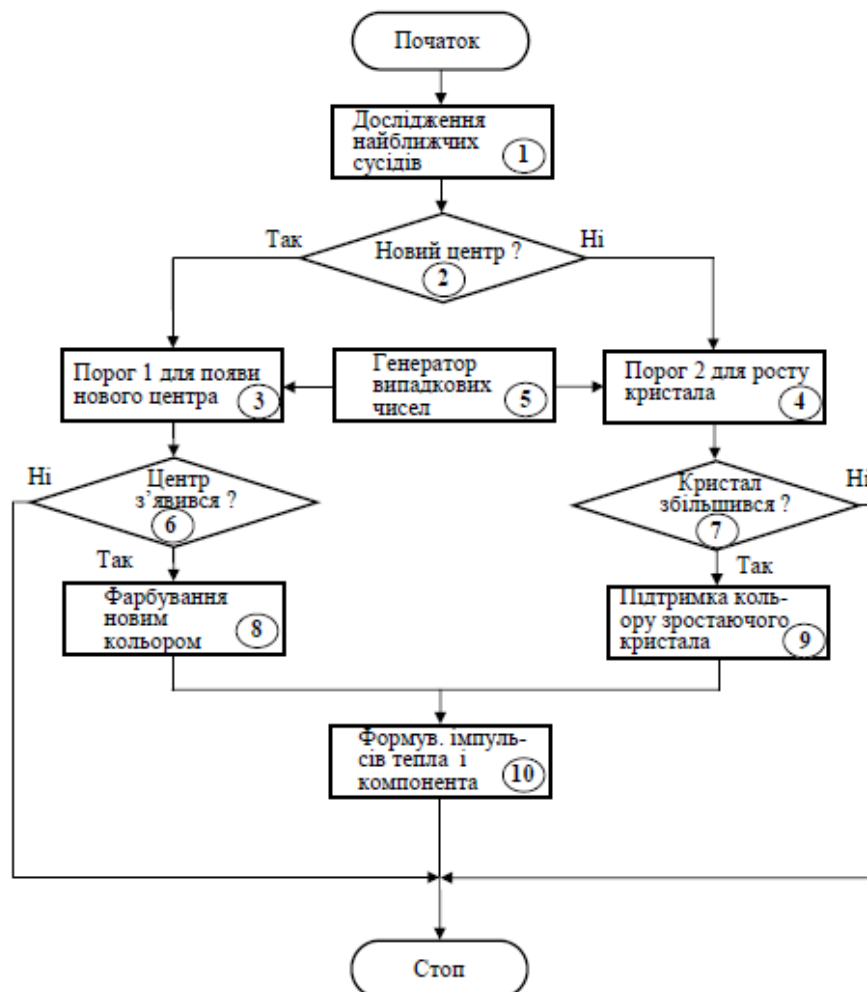


Рис. 3.3. Блок-схема ймовірнісного кліткового автомата імітаційної моделі кристалізації

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 у блок 8-3 або 8-4 потрапляє випадкове число i , якщо воно перевищує відповідний бар'єр, відбувається фазове перетворення, тобто перехід цієї точки із стану «рідке» у стан «тверде». Для прояву на екрані комп'ютера структури, яка формується, передбачено колірну диференціацію перетворень. Якщо утворюється новий центр кристалізації, він має новий колір (блок 8-8). Зростання наявного кристала підтримується фарбуванням кольором «твердого сусіда» (блок 8-9).

Фазовий перехід супроводжується виділенням тепла кристалізації і підвищенням концентрації другого компонента в осередку вибраної точки. Формування відповідних «імпульсів» виконується у блоці 8-10, наявність котрих враховується у блоці 3 загального алгоритму під час розрахунків теплового поля і концентрації другого компонента сплаву.

Вихідними даними (блок 12) є:

1. Файли, в яких у 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, які виникають;
 - швидкість утворення центрів кристалізації в ході кристалізації;
 - кількість твердої фази в ході кристалізації;
 - швидкість зростання кількості твердої фази в ході кристалізації.
2. Кольорова картинка структури твердого металу, яка моделюється клітковим автоматом та чорно-білий її варіант, який дає змогу контрастно виділити границі зерен металу в твердому стані.
3. Кількісна оцінка розміру зерна твердого металу.

3.5. Порядок виконання роботи

Для проведення комп'ютерних експериментів потрібно:

1. Ознайомитись із параметрами налаштування моделі. Її вихідний інтерфейс показано на рис. 3.4. Він складається з двох вікон і певної кількості кнопок управління. У лівому вікні (1 на рис. 3.4) моделюється структура твердого металу, а у правому вікні (2 на рис. 3.4) – крива охолодження.

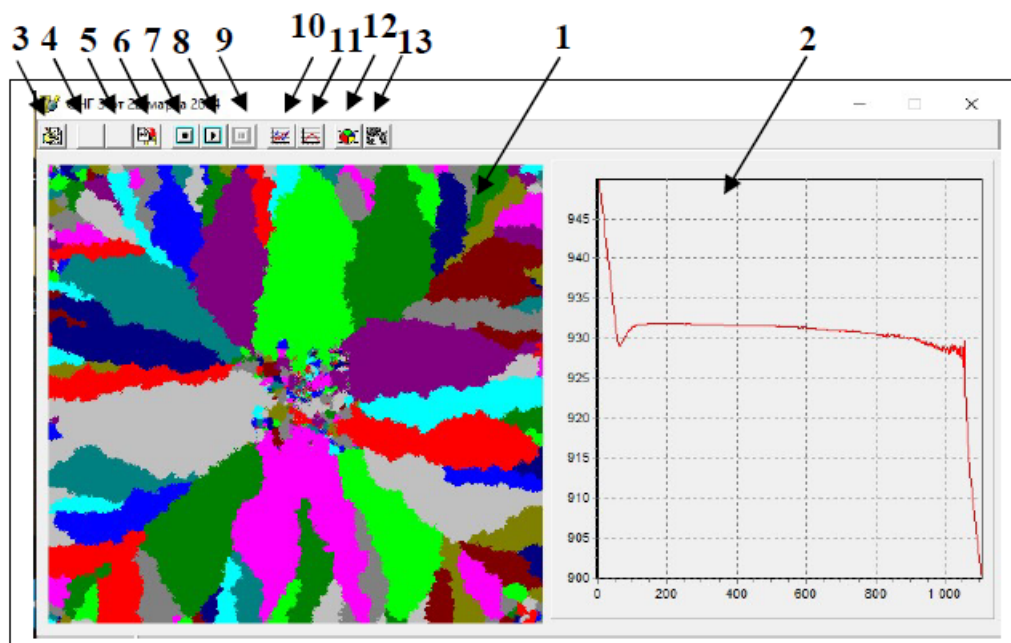


Рис. 3.4. Вихідний інтерфейс імітаційної моделі кристалізації металів:
1 – вікно, в якому відображається формування структури металу; 2 – вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження; 3 – вхід в налаштування моделі; 4, 5, 6 – кнопки фіксації результатів розрахунків (структура, крива охолодження, 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)

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. 3.5).

У першому вікні налаштування параметрів вводиться (рис. 3.5, 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 зверху»);
- коефіцієнт тепловіддачі ліворуч («Коеф. теплоотдачи слева»);
- коефіцієнт тепловіддачі праворуч («Коеф. теплоотдачи справа»);
- коефіцієнт тепловіддачі знизу («Коеф. теплоотдачи снизу»);
- коефіцієнт тепловіддачі зверху («Коеф. теплоотдачи сверху»).

Параметр	Значення
Начальная температура [K]	1031
Конечная температура [K]	940
Температура слева	298
Температура справа	298
Температура сверху	298
Температура снизу	298
Коеф. теплоотдачи слева	310
Коеф. теплоотдачи справа	310
Коеф. теплоотдачи сверху	310
Коеф. теплоотдачи снизу	310
Удельная теплоемкость	1255
Теплота кристаллизации	397000
Коеф. теплопроводности	213
Плотность	2700
Время наблюдения []	0.1
Размер тела по X [м]	0.025
Размер тела по Y [м]	0.07

а

Параметр	Значення
Темп. кристал. компон. А [K]	933
Концентрация модификатора [%]	0.2

б

Параметр	Значення
Интервал метастаб. для центров [K]	6
Мак. переохл. для центров [K]	50
Интервал метастаб. для роста [K]	0.1
Мак. переохл. для роста [K]	70
Коеф. пропорциональности	10500
☒ Учитывать пропорции образца	
☐ Учитывать стенки отливки	

в

Рис. 3.5. Параметры імітаційної моделі структуроутворення під час кристалізації чистого металу (Al): а – які характеризують умови охолодження та властивості металу; б – які зазначають стан рідкого металу; в – евристичні параметри

Варіювання зазначеними параметрами дає змогу моделювати умови охолодження майже для всіх типів лиття (в металева форму (кокіль), в піщану форму тощо). При цьому головною характеристикою є швидкість охолодження, яка розраховується в моделі і має 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).

У цьому ж вікні слід вести у відповідні вікна теплофізичні параметри металу, кристалізація якого моделюється (див. рис. 3.5, а):

- питому теплоємність («Удельная теплоемкость»);
- питому приховану теплоту кристалізації («Теплота кристаллизации»);
- коефіцієнт теплопровідності («Коэф. Теплопроводности»);
- густину («Плотность»).

Під час побудови математичної моделі теплопередачі ці параметри вважалися 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 (див. рис. 3.5, а).

У другому вікні налаштування моделі вводиться температура кристалізації металу («Темп. кристал. компон. A [K]») та наявність або відсутність модифікатора. Якщо в позиції «Концентрація модифікатора [%]» введено «0», то модифікування металу відсутнє (рис. 3.5, 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 пікселів (тобто 160 000 елементів). Так, наприклад, значення кількості модифікатора встановлено 0,2 %. Це означає, що у площині системи ($X \times Y$) в 160 000 пікселів 320 з них є твердими ще до початку кристалізації ($0,002 \times 160\,000$). Тому якщо за умовами завдання необхідно дослідити вплив модифікатора, то потрібно ввести кількість модифікатора у відповідне вікно параметрів.

У третьому вікні налаштувань вводяться так звані евристичні параметри (рис. 3.5, в):

- інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації («Інтервал метастаб. для центрів [K]»);
- максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації («Мах. переохл. для центрів [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. У цій моделі їх прийнято встановлювати на рівні 50 градусів.

Емпіричний коефіцієнт адаптації застосовують для «підлаштування» кількості тепла, яке виділяється під час кристалізації та компенсації впливу інших наближень, які вводились в процесі створення моделі.

У цій групі даних є ще дві позиції (див. рис. 3.5, в): урахування впливу стінок виливниці («Учитывать стенки оливки») та урахування геометричних пропорцій вилівка («Учитывать пропорции образца»). Їх сенс досить простий. Якщо в реальному експерименті стінки виливниці добре пофарбовано, то їхнім впливом на утворення зародків можна знехтувати. У 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 0.0.0006*».

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

2. Перевірити працездатність імітаційної моделі. Для цього слід запустити програму «*KRISTAL-1*» на виконання. В ході її роботи зафіксувати зображення структури металу, яка формується під час 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 наведено на рис. 3.6.

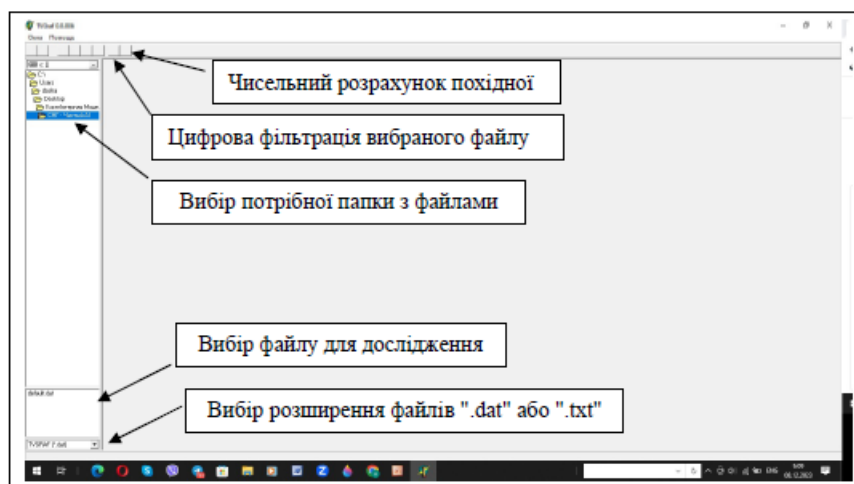


Рис. 3.6. Інтерфейс програми «*TVGraf 0.0.0006*»

На початку роботи з програмою «*TVGraf 0.0.0006*» насамперед слід встановити розширення «.txt» (ліворуч саме нижнє вікно). Після цього у вікні знизу 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».

У програмі передбачено можливість виведення у центральне вікно одночасно кількох файлів; це дає змогу їх сумісного аналізу.

Отримані в процесі роботи моделі файли переглянути використовуючи програму «*TVGraf 0.0.0006*».

3. Дослідити вплив швидкості охолодження на утворення центрів кристалізації та структуру твердого металу під час гомогенної кристалізації. Для початку комп'ютерного експерименту потрібно встановити швидкість охолодження $0,5 \text{ K / c}$. Для цього виконуються наступні дії:

– запустити програму та зупинити її виконання після початку кристалізації, коли температура на кривій охолодження стає трохи нижчою від встановленої температури кристалізації металу як показано на рис. 3.7 (кнопка 9 на рис. 3.4);

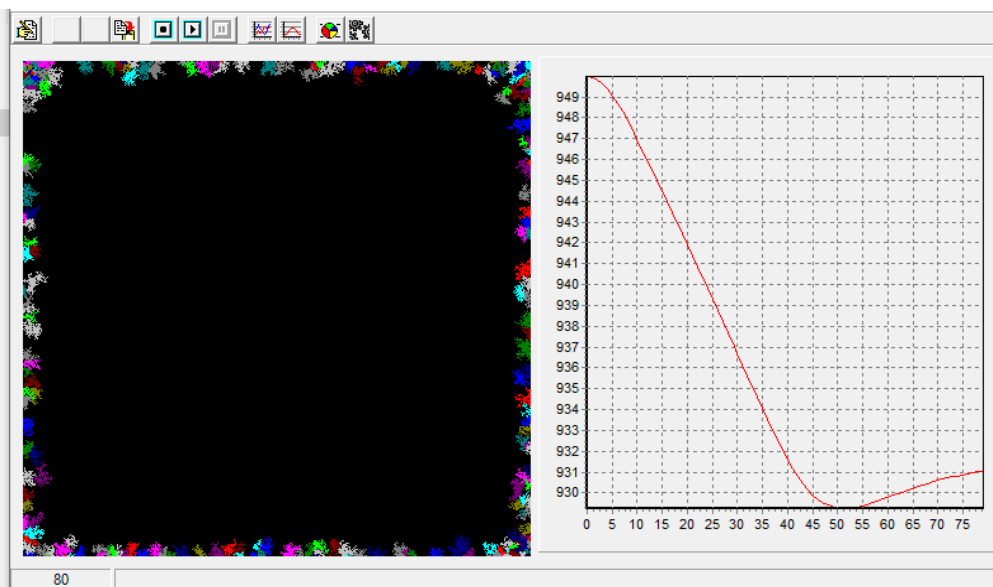


Рис. 3.7. Приклад зупинки роботи комп'ютерної програми для розрахунку швидкості охолодження

– зберегти криву охолодження в файлі, для чого слід натиснути відповідну кнопку моделі (кнопка 6 на рис. 3.4);

– запустити програму «*TVGraf 0.0.0006*», відкрити файл «*Krv.txt*», в якому зберігається модельована крива охолодження, і за нею розрахувати швидкість охолодження в даному експерименті, як показано на рис. 3.8;

– за необхідності слід скоригувати коефіцієнти тепловіддачі таким чином щоб швидкість охолодження становила $0,5 \text{ K / c}$. Зміна швидкості охолодження здійснюється з допомогою зміни коефіцієнтів тепловіддачі.

Після проведення комп'ютерного експерименту із швидкістю охолодження $0,5 \text{ K / c}$ потрібно зберегти змодельовану структуру (кнопка 5 на

рис. 3.4) та інформацію про параметри кристалізації (кнопка 6 на рис. 3.4). 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.

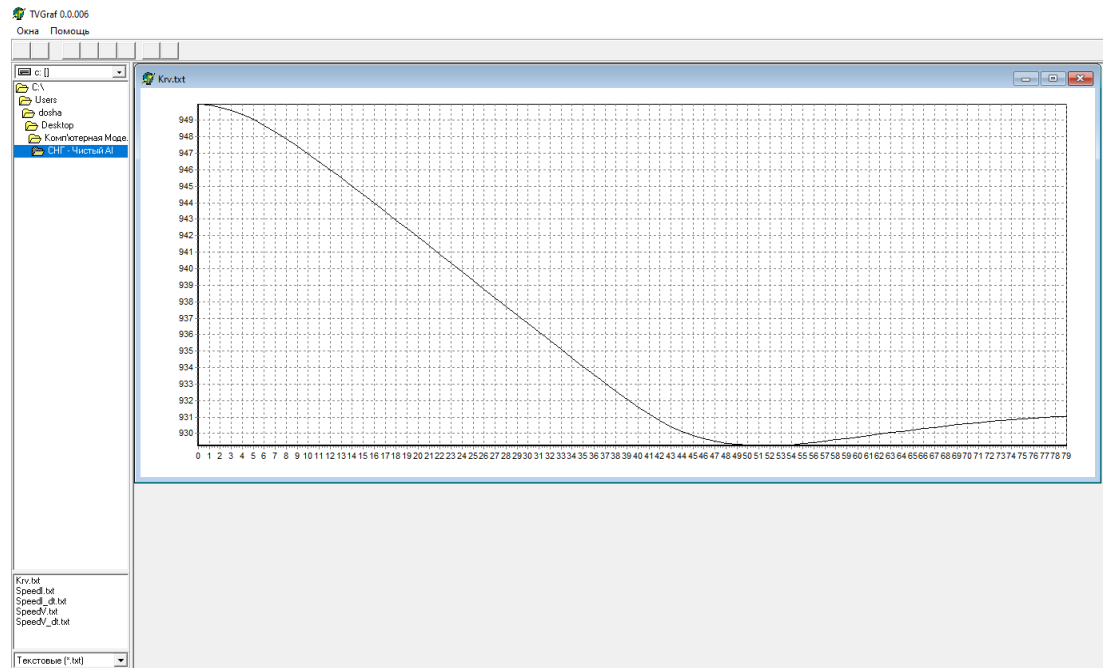


Рис. 3.8. Приклад розрахунку швидкості охолодження в комп'ютерному експерименті

4. Повторити пункт 3, послідовно встановивши швидкості охолодження 1,0; 2,0; 4,0 та 6,0 К / с.
5. Проаналізувати отримані результати.
6. Сформулювати висновки по роботі.
7. Оформити звіт.

3.6. Контрольні запитання

1. Чому формування структури металів і сплавів під час 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 під час кристалізації металів і сплавів?
5. Що вивчає синергетика?

6. Що являє собою клітковий автомат?
7. З якою метою в управлінні клітковим автоматом застосовують генератор випадкових чисел?
8. Що з фізичної точки зору являє собою кристалізація?
9. Що вважається «рушійною силою» кристалізації?
10. Що мають на увазі під терміном «температура кристалізації»?
11. Що мають на увазі під терміном «ступінь переохолодження»?
12. Які параметри впливають на величину переохолодження?
13. Які параметри впливають на структуру металу в твердому стані?
14. Які умови необхідні для отримання аморфного стану у металевих матеріалах?

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 4.

КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВПЛИВУ МОДИФІКАТОРА НА УТВОРЕННЯ ОСЕРЕДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ АЛЮМІНІЮ

Мета роботи: дослідити вплив модифікатора на утворення центрів кристалізації та структуру твердого металу за різної швидкості охолодження з допомогою комп'ютерної моделі «*KRISTAL-1*».

4.1. Теоретичні відомості

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

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 відсотка.

Для виливків великої маси охолодження з великою швидкістю практично неможливе. Подрібнення зерна для отримання 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 має не перевищувати 15 % – правило Данкова), що і основний метал. Температура плавлення модифікатора має бути вищою за температуру кристалізації основного металу. Модифікаторами можуть бути метали, які утворюють в розплаві тугоплавкі хімічні сполуки.

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

Можливість комп'ютерного експерименту за наявності модифікатора в цій комп'ютерній моделі визначається у другому вікні налаштування (див. рис. 3.5, 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 цій 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 пікселів (тобто 160 000 елементів). Введене в налаштуванні моделі значення кількості модифікатора, наприклад, 0,2 % означає, що у площині системи ($X \times Y$) в 160 000 пікселів 320 з них є твердими ще до початку кристалізації ($0,002 \times 160\,000$). По площині системи вони розподілені випадковим чином.

4.2. Порядок виконання роботи

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

1. За допомогою підбору коефіцієнтів тепловіддачі встановити швидкість охолодження 2,0 К / с, як показано у комп'ютерному практикумі № 3.
2. За цієї швидкості охолодження 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 кількості утворених центрів кристалізації та швидкість їх утворення.
3. У параметрах налаштування ввести 0,1 % модифікатора і повторити комп'ютерний експеримент, зберігши отримані результати.
4. Повторити комп'ютерні експерименти, встановлюючи послідовно швидкості охолодження 5,0 та 7,0 К / с за кількості модифікатора 0,5 %, 1,0 % та 2,0 % для кожної з них. Після завершення кожного експерименту зберегти файли, які містять інформацію про кількості утворених центрів кристалізації та швидкість їх утворення.
5. За допомогою комп'ютерної програми «TVGraf 0.0.0006» проаналізувати отримані результати, як описано у практикумі № 3.
6. Сформулювати висновки по роботі.
7. Оформити звіт.

4.3. Контрольні запитання

1. Що являє собою модифікування розплавів?
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?

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 5. КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ МОЖЛИВОСТЕЙ КЕРОВАНОГО ВПЛИВУ УМОВ ОХОЛОДЖЕННЯ ПІД ЧАС КРИСТАЛІЗАЦІЇ НА ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ ТВЕРДОГО МЕТАЛУ

Мета роботи: дослідити можливість керованого впливу на формування структури металу в процесі його затвердіння за допомогою зміни швидкості охолодження в ході кристалізації із застосуванням комп'ютерної моделі «KRISTAL-1».

5.1. Теоретичні відомості

Відомо, що збільшення швидкості охолодження призводить до змін у структурі металу. За результатами моделювання в комп'ютерному експерименті з імітаційною моделлю кристалізації чистих металів встановлено, що ці зміни обумовлено зміною кількості центрів кристалізації, які утворюються за наявності переохолодження (рис. 5.1 та комп'ютерний практикум № 3).

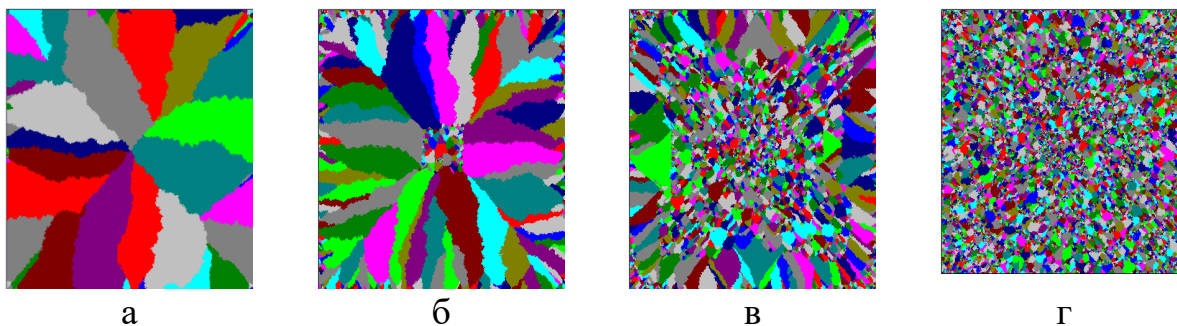


Рис. 5.1. Макроструктури чистого алюмінію, змодельовані за різних швидкостей охолодження $V_{ох}$: а – 0,17 К/с; б – 3,3 К/с; в – 5,0 К/с; г – 6,7 К/с

Зміни, які відбуваються під час кристалізації в структурі твердого металу, параметрах кристалізації, теплових ефектах на кривих охолодження за різних швидкостей охолодження можна пояснити процесами, схематично показаними на рис. 5.2.

У випадку повільного охолодження (позначено 1 на рис. 5.2) 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, значною мірою 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 зростання вже наявних кристалів.

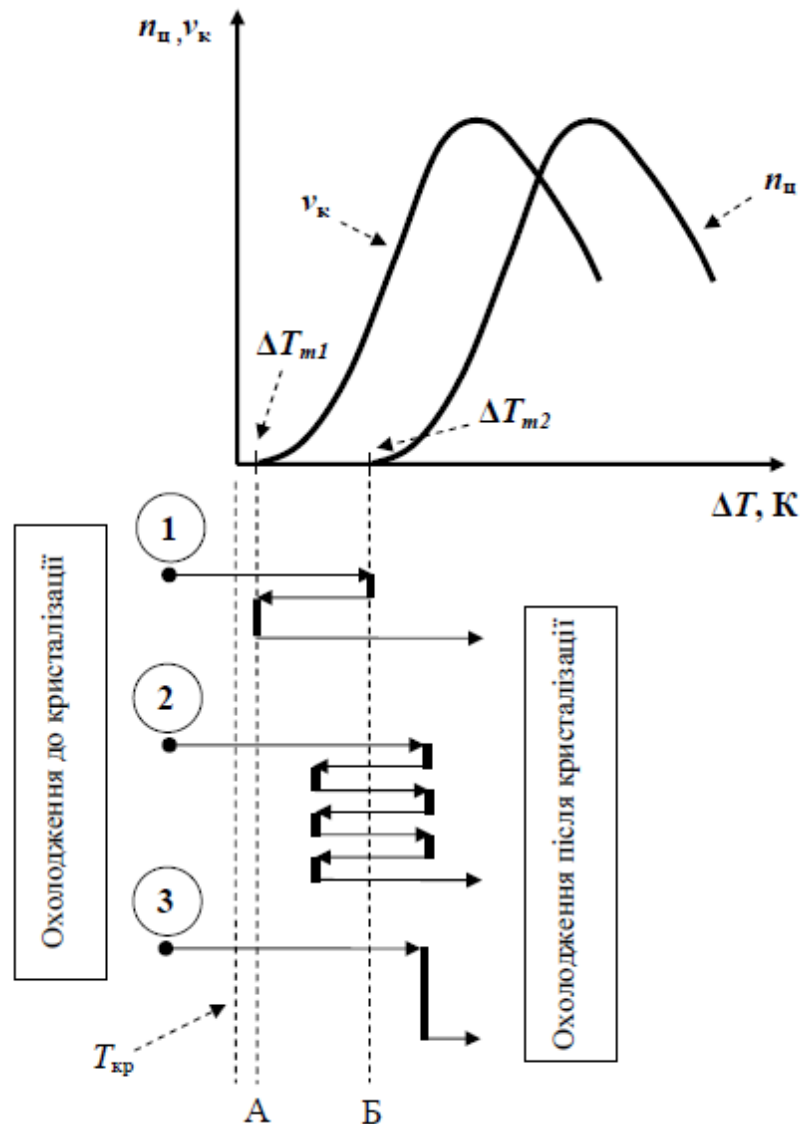
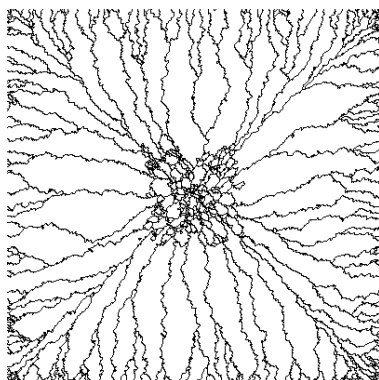


Рис. 5.2. Схематичне зображення гомогенного утворення центрів кристалізації і їх росту за різної швидкості охолодження (ΔT – переохолодження; $n_{ц}$ – швидкість утворення центрів кристалізації; $v_{к}$ – лінійна швидкість росту кристала; ΔT_{m1} – інтервал метастабільності для швидкості росту кристала; 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

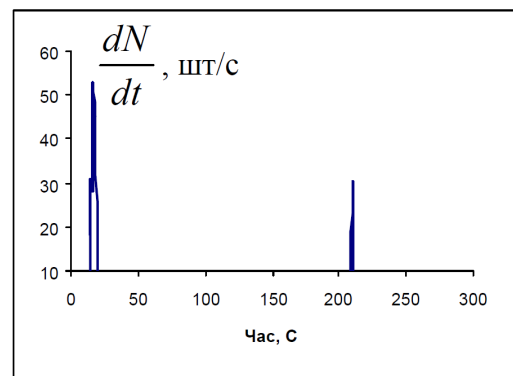
Після закінчення фазового перетворення метал просто охолоджується і його температура поступово знижується. При більш швидкому охолодженні (на рис. 5.2 позначено як 2) центри кристалізації починають утворюватися після досягнення лінії Б. Але, через більш швидке охолодження, температура у всієї системи або в окремих її частинах знову знижується до лінії Б і створюються умови для утворення нових зародків твердої фази. Їх виникнення зменшує величину переохолодження, і продовжується зростання вже наявних кристалів. Такі процеси можуть відбуватися або один, або декілька разів, після чого кристалізація закінчується і метал, знов-таки, 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 зростання. По закінченні процесу кристалізації метал охолоджується.

Утворенням зародків у кілька етапів можна пояснити утворення класичної тризонної структури вилівка (рис. 5.3). Центри кристалізації з'являються на двох етапах: на початку кристалізації та на стадії, яка відповідає формуванню центральної зони рівновісних кристалів.



а



б

Рис. 5.3. Змодельована тризонна структура алюмінію (а) та залежність швидкості утворення центрів кристалізації від часу (б) в обчислювальному експерименті з імітаційною моделлю

Застосування кліткових автоматів значною мірою спрощує математичні розрахунки під час моделювання кристалізації та надає принципову можливість моделювання полікристалічної структури металевих матеріалів. Вплив зовнішніх умов охолодження досліджуваної системи (розплаву) на функціонування кліткового 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 отримано модельні структури, наведені на рис. 5.4 та рис. 5.5.

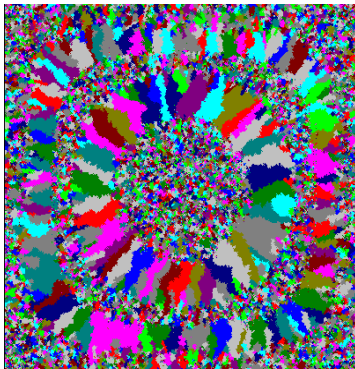


Рис. 5.4. Макроструктура чистого алюмінію, змодельована черговою зміною коефіцієнтів тепловіддачі в процесі кристалізації

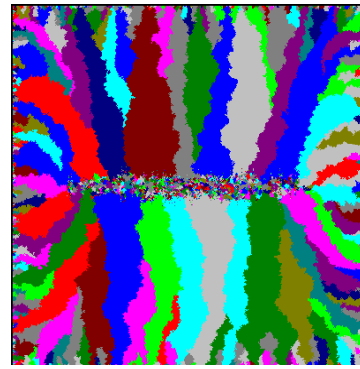


Рис. 5.5. Макроструктура чистого алюмінію, змодельована асиметричними варіаціями коефіцієнтів теплопередачі

На рис. 5.4 показано структуру алюмінію, отриману за допомогою багаторазової зміни інтенсивності відведення тепла. Спочатку дрібні зерна формувались на границях системи в умовах високої швидкості охолодження. Потім інтенсивність відведення тепла з усіх боків симетрично зменшувалася. При цьому розмір зерен збільшувався. Через деякий час швидкість охолодження почергово збільшувалася та зменшувалася. В результаті кінцева структура складається з кількох ділянок з різними формами та середнім розміром зерен (див. рис. 5.4).

На рис. 5.5 показано складну алюмінієву структуру, в якій наявні зерна різної форми, розмірів та орієнтації. Така структура алюмінію є результатом зміни швидкості охолодження та асиметричності величин коефіцієнтів відведення тепла з різних сторін, значення яких також змінювали в ході експерименту з допомогою підбору параметрів моделі.

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 у реальних виробках.

5.2. Порядок виконання роботи

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

1. Запустити програму «*KRISTAL-1*» та налаштувати імітаційну модель кристалізації чистих металів, як зазначено у комп'ютерному практикумі № 3.

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, див. рис. 3.4). 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.

5.3. 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 в ході кристалізації?

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ № 6. ВПЛИВ ШВИДКОСТІ ОХОЛОДЖЕННЯ НА УТВОРЕННЯ ЗАРОДКІВ ТВЕРДОЇ ФАЗИ ПІД ЧАС 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».

6.1. Теоретичні відомості

Імітаційна модель кристалізації сплавів значно складніша за комп'ютерну модель кристалізації чистих металів і потребує набагато більше обчислень. Окрім розрахунку зміни температури під час охолодження системи, потрібно розраховувати і зміну складу рідкої фази. Тому тут застосовано математичні моделі теплопровідності, дифузії та діаграми стану з евтектикою. Загальний алгоритм імітаційної моделі кристалізації сплавів включає математичні моделі теплової та дифузійної задач.

Розглянемо загальну постановку внутрішньої задачі теплообміну, яка виникає під час 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 λ (Вт/(м · К)).

В основу математичного формулювання задачі теплопровідності покладено закон збереження енергії, який виражається рівнянням:

$$c' = \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \text{div}[q(x, y, t)] , \quad x, y \in G , \quad (6.1)$$

де $q(x, y, t)$ – щільність теплового потоку;

$T(x, y, t)$ – 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:

$$q(x, y, t) = -\lambda \cdot \text{grad}[T(x, y, t)] , \quad (6.2)$$

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

$$c' \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div}[\lambda \cdot \operatorname{grad}[T(x, y, t)]] , \quad (6.3)$$

де c' – питома теплоємність;

ρ – густина;

λ – коефіцієнт теплопровідності.

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

$$T(x, y, 0) = T(x, y), \quad x, y \in G \quad (6.4)$$

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

$$q = f(T_w), \quad (6.5)$$

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

Тепер розглянемо безпосередню постановку двовимірної задачі теплопровідності для даної імітаційної моделі, яка виникає в процесі розрахунку температури прямокутної заготовки та враховує виділення теплоти під час фазових перетворень. Вважаємо, що охолодження тіла відбувається з усіх чотирьох сторін поверхні, а температурне поле змінюється лише у площині, перпендикулярній до осі тіла. Тобто розглядаємо нескінченно тонкий поперечний зріз прямокутного тіла.

У цій площині введемо систему координат OXY і позначимо через δ_x довжину тіла, а через δ_y – його ширину. Вище було введено спрощення, що теплофізичні характеристики охолоджуваного металу не залежать від температури. Тому для області $0 \leq x \leq \delta_x$, $0 \leq y \leq \delta_y$ перепишемо рівняння теплопровідності (6.3) у такому вигляді:

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t), \quad (6.6)$$

де $a = \frac{\lambda}{c'}$ – коефіцієнт температуропровідності;

$F(x, y, t)$ – додатковий член, який враховує виділення (чи поглинання) теплоти під час фазового перетворення.

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 можна записати як:

$$F(x, y, t) = \frac{L}{c} \cdot \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t}, \quad (6.7)$$

де L – прихована питома теплота кристалізації (плавлення);

$\varepsilon(x, y, t)$ – частка твердої фази в деякому елементарному об'ємі $\partial x \cdot \partial y$.

Граничні умови з усіх сторін є граничними умовами 3-го роду (6.5), що відповідає постійним значенням температури навколишнього середовища $T_c = const$ і коефіцієнтів тепловідведення з чотирьох боків $\alpha_1 - \alpha_4$:

$$\frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_c], \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_c], \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_c], \quad (6.10)$$

$$\frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = -\alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_c], \quad (6.11)$$

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 тощо. Достатньо великий набір практично

цікавих випадків можна отримати за допомогою зміни величин коефіцієнтів теплопровідності $\alpha_1 - \alpha_4$.

Припускаючи, що в початковий момент часу тіло є рівномірно прогрітим до температури T_0 , запишемо більш детально початкову умову (6.4):

$$T(x, y, 0) = T_0 = \text{const}. \quad (6.12)$$

Отже математична постановка задачі для розрахунку температури в довільний момент часу в кожній із точок системи складається з виразів (6.6) – (6.12) і разом вони складають математичну модель охолодження прямокутного тіла (математична модель теплопровідності), яка використовується для обчислення температури в імітаційній моделі кристалізації:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t), \\ T(x, y, 0) = T_0 = \text{const}, \\ \frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_c], \\ \frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = -\alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_c]. \end{array} \right. \quad (6.13)$$

Математичну модель дифузії можна побудувати майже аналогічним чином. 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:

$$\frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \quad (6.14)$$

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. У свою чергу, температуропровідність залежить від хімічного складу сплаву. Але на даному етапі ефектами взаємовпливу краще знехтувати, що значною мірою 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:

$$\frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \quad (6.18)$$

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

$$K(x, y, 0) = K_0(x, y). \quad (6.19)$$

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 певної кількості твердої фази призводить до виділення або поглинання другого компонента сплаву. В результаті змінюється концентрація рідкої фази $K(x, y)$ біля точки фазового перетворення і дифузія відбувається у її локальних мікрообластях. У твердій фазі за час кристалізації всього об'єму дифузія в практично не відбувається через значно меншу величину коефіцієнта дифузії. Тому нею можна знехтувати.

Таким чином, загальна математична постановка задачі для визначення концентрації другого компонента сплаву об'єднує рівняння (6.14) – (6.19):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \\ K(x, y, 0) = K_0(x, y), \\ \frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \end{array} \right. \quad (6.20)$$

Задача (6.20) майже подібна до задачі (6.13), і якщо в останній покласти рівними нулю коефіцієнти тепловідведення $\alpha_1 - \alpha_4$, то (6.13) стане аналогічною до (6.20). Ця обставина спрощує практичну реалізацію розрахунків і алгоритму.

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

Враховуючи необхідність введення системного часу в моделі, порядок розрахунків має бути таким. Перш за все чисельно розв'язується задача (6.13), в якій крок за часом i задає системний час роботи імітаційної моделі. Один крок системного часу є часом розрахунку дифузійної задачі (6.20), на якому в початковій умові кожен раз змінюється $K_0(x, y)$ відповідно до фазових перетворень у локальних областях відповідно до діаграми 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. 6.1). В даному випадку зручно застосувати рівняння прямої, яка проходить через дві точки (x_1, y_1) та (x_2, y_2) :

$$\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1}. \quad (6.21)$$

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

$$T_{L_{1,2}} = T_{kp_1, kp_2} - (T_{kp_1, kp_2} - T_e) \cdot \frac{C_1}{C_t}, \quad (6.22)$$

де $T_{кр1}, T_{кр2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ;
 T_e – температура кристалізації евтектики;
 C_1 – концентрація компонента B в розплаві;
 C_e – евтектична концентрація.

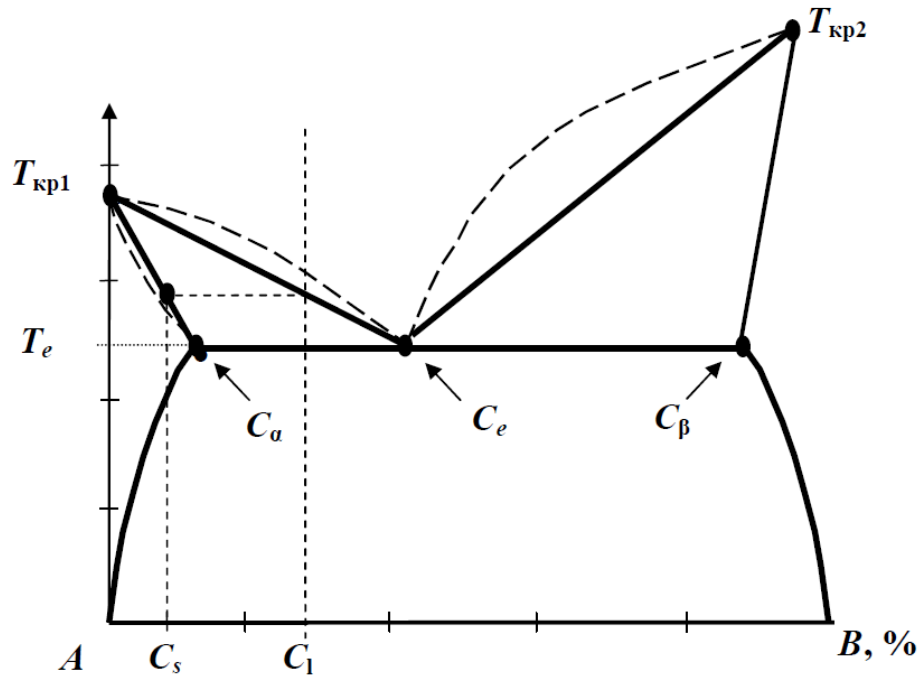


Рис. 6.1. Діаграма стану бінарного сплаву з евтектикою:

$T_{кр1}, T_{кр2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ;
 T_e – температура кристалізації евтектики; C_a, C_β – максимальні розчинності в α - і β - твердих розчинах, відповідно, компонентів A і B ; C_e – евтектична концентрація;
 C_1 – концентрація компонента B у розплаві; C_s – концентрація компонента B у твердому розчині

Склад твердого розчину за температури $T(t)$ також можна визначити за допомогою рівняння прямої (6.21). Для α -твердого розчину:

$$C_{s1} = C_\alpha \cdot \frac{T_{кр1} - T(t)}{T_{кр1} - T_e}, \quad (6.23)$$

та для β -твердого розчину:

$$C_{s2} = C_\beta \cdot \frac{T_{кр2} - T(t)}{T_{кр2} - T_e}, \quad (6.24)$$

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 (6.22) – (6.24), розрахувати переохолодження в будь-якій точці.

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

6.2. 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 рис. 6.2. Він містить п'ять вікон і певну кількість кнопок управління. В лівому верхньому вікні (1 на рис. 6.2) моделюється структура твердого металу, у лівому вікні 3 відображається стан системи в даній точці («рідке – тверде»), а у вікні 4 відображається доевтектичний або заевтектичний 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, у яких зберігається інформація про параметри кристалізації, подібне описаному в комп'ютерному практикумі № 3.

У цій імітаційній моделі кристалізації сплавів друга частина вхідних параметрів дещо відрізняється від моделі кристалізації чистих металів. Окрім температури кристалізації чистого металу та наявності і кількості модифікатора, добавлено характерні точки відповідної діаграми стану та коефіцієнт дифузії (рис. 6.3):

- максимальна розчинність другого елемента «*B*» в «*A*» (Мак. розчинність AB [%]);
- максимальна розчинність елемента «*A*» в «*B*» (Мак. розчинність BA [%]);
- температура кристалізації евтектики (Темп. кристал. евтектики [K]);
- температура кристалізації другого компонента (Темп. кристал. компон. B [K]);
- евтектичний склад сплаву (Концентрація евтектики [%]);

- склад сплаву, для якого проводиться моделювання (Концентрація сплава [%]);
- коефіцієнт дифузії другого компонента « B » в основному компоненті « A » (Коэф. диф.).

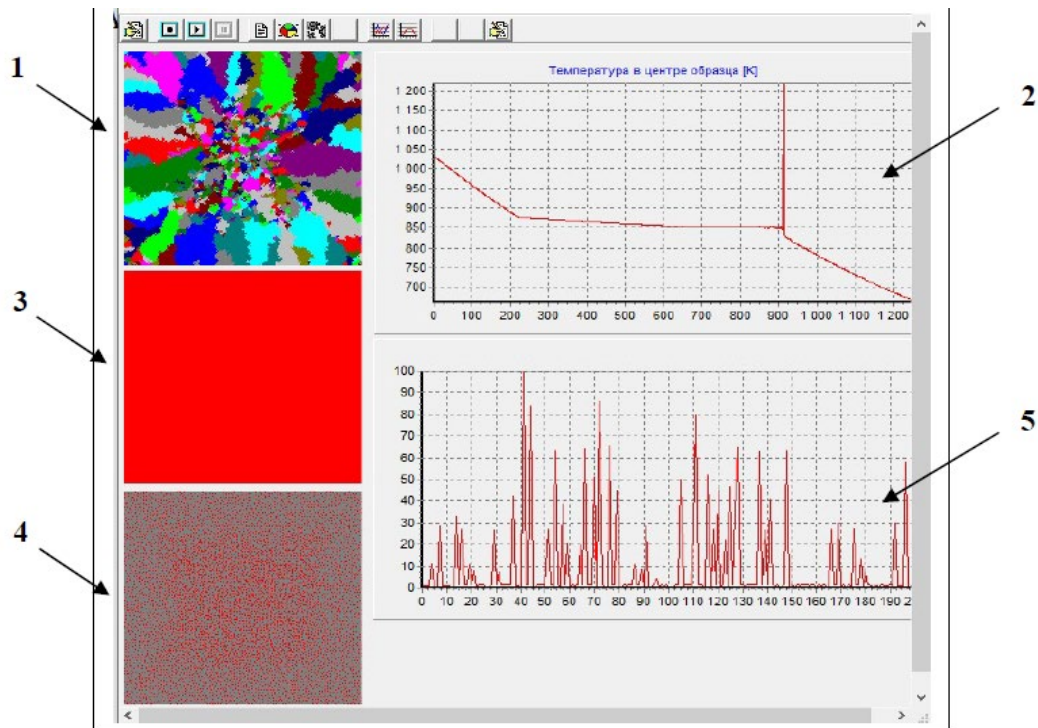


Рис. 6.2. Вихідний інтерфейс імітаційної моделі кристалізації бінарних сплавів: 1 – вікно, в якому відображається формування структури сплаву; 2 - вікно, в якому відображається змодельована крива охолодження; 3 - вікно, в якому відображається стан системи в даній точці («рідке – тверде»); 4 – вікно, 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 К / с, як описано в комп'ютерному практикумі № 3.

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.

Редактирование данных

TabSheet1 TabSheet2 TabSheet3

GroupBox1

Темп. кристал. компонент A [K]	933	Темп. кристал. компонент B [K]	1414
Мак. растворимость AB [%B]	1.65	Мак. растворимость BA [%B]	100
Темп. кристал. эвтектики [K]	850		
Концентрация эвтектики [%B]	12.6		

GroupBox2

☒ Константа Концентрация сплава [%] 8.2

☐ Диапазон Концентрация сплава [%] 0 30

GroupBox3

Концентрация модификатора [%] 0

Козф. диф 1E-5

Да Нет

**Рис. 6.3. Додаткові параметри імітаційної моделі
структурування під час кристалізації сплаву з евтектикою**

6.3. 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?

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Доній О. М. 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 / О. М. Доній, В. В. Христенко, Ю. В. Яворський. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 153 с.
2. Кравченко І. В. Комп'ютерне моделювання: системи і процеси / І. В. Кравченко, В. І. Микитенко, Г. С. Тимчик. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 215 с.
3. Лазарєв Ю. Ф. Моделювання на ЕОМ. Навчальний посібник / Ю. Ф. Лазарєв. – Київ : Політехніка, 2007. – 290 с.
4. Потапова Н. А. Математичне та комп'ютерне моделювання функціонування логістичних процесів та систем / Н. А. Потапова, Л. О. Волонтир, О. В. Зелінська // Вісник Хмельницького національного університету. Серія: Технічні науки. – 2022. – № 2. – С. 73–80.
5. Дроговоз Н. Досвід навчання елементів комп'ютерного моделювання майбутніх учителів фізики / Н. Дроговоз, О. Присяжнюк, О. Резіна // Наукові записки. Серія: Проблеми методики фізико-математичної і технологічної освіти. – 2013. – № 5.
6. Бугаєць Н.О. Комп'ютерний експеримент у процесі розв'язування навчально-дослідницьких задач // Науковий часопис НПУ ім. М. П. Драгоманова. Серія №2. Комп'ютерно-орієнтовані системи навчання. – К.: НПУ ім. М.П. Драгоманова. – 2017. – №19. – С. 186 – 194.

ДОДАТОК А.

ТАБЛИЦІ З НОМЕРАМИ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ ТА ВИХІДНІ ДАНІ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ У КОМП'ЮТЕРНИХ ПРАКТИКУМАХ № 1 і № 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)**

Питома теплоємність c , Дж/(кг·К)		
T , К	Al $\rho = 2\,700 \text{ кг/м}^3$	Cu $\rho = 8\,873 \text{ кг/м}^3$
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.
КОМП'ЮТЕРНА ПРОГРАМА ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ
ОБЧИСЛЕНЬ У КОМП'ЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМІ № 1
НА МОВІ «QBASIC», ЯКА РЕАЛІЗУЄ ЧИСЕЛЬНИЙ
РОЗВ'ЯЗОК ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО РІВНЯННЯ ПЕРШОГО
ПОРЯДКУ МЕТОДОМ ЕЙЛЕРА

```
CLS
DATA 20,650,700
READ T0, Tk, Tp
T0 = T0 + 273
TK = TK + 273
TP = TP + 273
DATA 356.8,0.14
READ a0, a1
DATA 130,5.67e-8,0,8773
READ AL, Sig, Eps, Ro
INPUT "r1,r2,r3:"; r1, r2, r3
INPUT "h:"; h
' Calculation S, V, M
Pi = 3.14
S = 2 * (R1 * R2 + R1 * R3 + R2 * R3)
V = R1 * R2 * R3
M = RO * V
PRINT "S="; S, "V="; V, "M="; M: SLEEP
' Calculation k1, k2
k1 = AL * S / M
k2 = SIG * EPS * S / M
PRINT "k1="; k1, "k2="; k2: SLEEP
' BEGIN
i = 0: j = 0: t = 0
Np = 60 * 10
Tt = T0
PRINT i, t, INT(Tt), INT(Tt) - 273
' Main CALCULATION
10  j = j + h
    t = t + h
    R1 = k1 * (TP - Tt) + k2 * (TP ^ 4 - Tt ^ 4)
    R2 = a0 + a1 * Tt
    Tt = Tt + h * R1 / R2
    IF j = Np THEN
        i = i + 1
```

```

        PRINT i, t, INT(Tt), INT(Tt) - 273
        j = 0
    END IF
    IF Tt < Tk THEN GOTO 10
    PRINT i, t, INT(Tt), INT(Tt) - 273
END

```

Оператори «*DATA*» та «*READ*» використовуються для введення числової інформації («*DATA*») в комірки пам'яті, які зазначено в операторі «*READ*». Оператори «*INPUT*» та «*PRINT*» використовують для введення чисельної інформації з клавіатури («*INPUT*») та виведення інформації на монітор («*PRINT*»). «*IF _ THEN _ ELSE*» – умовний оператор. Він складається з двох блоків виконуваних операторів: один блок виконується, якщо умова дорівнює *True*, а інший блок виконується, якщо умова дорівнює *False*. «*INT(x)*» – вбудована функція, яка виділяє цілу частину числа. «*SLEEP*» – зупинка виконання програми і очікування до натискання на довільну клавішу.

ДОДАТОК В.
ВАРІАНТИ ПЕРШОЇ ЧАСТИНИ ЗАВДАНЬ ДЛЯ
РОЗРАХУНКІВ У КОМП'ЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМІ № 2

Таблиця В.1. Завдання для варіанта № 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 В.2. Завдання для варіанта № 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 В.3. Завдання для варіанта № 3

№	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	0,02	0,3	21,0

Таблиця В.4. Завдання для варіанта № 4

№	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 В.5. Завдання для варіанта № 5

№	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	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 В.6. Завдання для варіанта № 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	0,02	0,3	2,8

Таблиця В.7. Завдання для варіанта № 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
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 В.8. Завдання для варіанта № 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 В.9. Завдання для варіанта № 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 В.10. Завдання для варіанта № 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 В.11. Завдання для варіанта № 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 В.12. Завдання для варіанта № 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
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 В.13. Завдання для варіанта № 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	0,02	0,3	2,8

Таблиця В.14. Завдання для варіанта № 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 В.15. Завдання для варіанта № 15

№	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	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 В.16. Завдання для варіанта № 16

№	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 В.17. Завдання для варіанта № 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	0,02	0,3	21,0

Таблиця В.18. Завдання для варіанта № 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 В.19. Завдання для варіанта № 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
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 В.20. Завдання для варіанта № 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 Г. ВАРІАНТИ ДРУГОЇ ЧАСТИНИ ЗАВДАНЬ ДЛЯ РОЗРАХУНКІВ У КОМП'ЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМІ № 2

Г.1. Завдання для варіанта № 1

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і відносного видовження δ :

$$\sigma_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$650 \leq \sigma_B \leq 720^* \text{ МПа},$$

$$14 \leq \delta \leq 20^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.1. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$\sigma_B, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			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

Г.2. Завдання для варіанта № 2

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_T і відносного звуження φ :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\varphi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T і відносного звуження $\varphi \geq 65\%$.

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

$$420 \leq \sigma_T \leq 500^* \text{ МПа},$$

$$67 \leq \varphi \leq 73^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.2. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$\sigma_T, \text{МПа}$			$\varphi, \%$		
			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

Г.3. Завдання для варіанта № 3

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості a_H :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості $a_H \geq 250 \text{ Дж/см}^2$.

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

$$670 \leq \sigma_T \leq 700^* \text{ МПа},$$

$$220 \leq a_H \leq 230^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.3. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _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	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

Г.4. Завдання для варіанта № 4

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і ударної в'язкості a_H:

$$\sigma_B = f_1(C, T_{від}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{від}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень границі міцності σ_B та ударної в'язкості a_H ≥ 210 Дж/см².

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

$$800 \leq \sigma_B \leq 820^* \text{ МПа},$$

$$210 \leq a_H \leq 220^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.4. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _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

Г.5. Завдання для варіанта № 5

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_T і відносного видовження δ :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$650 \leq \sigma_T \leq 690^* \text{ МПа},$$

$$18 \leq \delta \leq 20^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.5. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$\sigma_T, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			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

Г.6. Завдання для варіанта № 6

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і відносного видовження δ :

$$\sigma_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$640 \leq \sigma_B \leq 700^* \text{ МПа},$$

$$11 \leq \delta \leq 19^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.6. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	σ_B , МПа			δ , %		
			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

Г.7. Завдання для варіанта № 7

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_T і відносного звуження φ :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\varphi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T і відносного звуження $\varphi \geq 67 \%$.

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

$$430 \leq \sigma_T \leq 510^* \text{ МПа},$$

$$65 \leq \varphi \leq 75^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.7. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _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	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

Г.8. Завдання для варіанта № 8

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості a_H:

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості a_H ≥ 240 Дж/см².

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

$$690 \leq \sigma_T \leq 710^* \text{ МПа},$$

$$200 \leq a_H \leq 220^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.8. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _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

Г.9. Завдання для варіанта № 9

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і ударної в'язкості a_H :

$$\sigma_B = f_1(C, T_{від}),$$
$$a_H = f_2(C, T_{від}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень границі міцності σ_B і ударної в'язкості $a_H \geq 200$ Дж/см².

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

$$810 \leq \sigma_B \leq 830^* \text{ МПа},$$
$$200 \leq a_H \leq 220^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.9. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ_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

Г.10. Завдання для варіанта № 10

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_T і відносного видовження δ :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{від}),$$
$$\delta = f_2(C, T_{від}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$635 \leq \sigma_T \leq 680^* \text{ МПа},$$

$$17 \leq \delta \leq 23^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.10. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$\sigma_T, \text{МПа}$			$\delta, \%$		
			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

Г.11. Завдання для варіанта № 11

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і відносного видовження δ :

$$\sigma_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$650 \leq \sigma_B \leq 720^* \text{ МПа},$$

$$14 \leq \delta \leq 20^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.11. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _в , МПа			δ, %		
			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

Г.12. Завдання для варіанта № 12

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_т і відносного звуження φ:

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\varphi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_т і відносного звуження φ ≥ 65 %.

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

$$420 \leq \sigma_T \leq 500^* \text{ МПа},$$

$$67 \leq \varphi \leq 73^* \text{ \%}.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.12. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _т , 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

Г.13. Завдання для варіанта № 13

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості a_H :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{від}),$$
$$a_H = f_2(C, T_{від}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості $a_H \geq 250$ Дж/см².

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

$$670 \leq \sigma_T \leq 700^* \text{ МПа},$$
$$220 \leq a_H \leq 230^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.13. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _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	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

Г.14. Завдання для варіанта № 14

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і ударної в'язкості a_H :

$$\sigma_B = f_1(C, T_{від}),$$
$$a_H = f_2(C, T_{від}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень границі міцності σ_B і ударної в'язкості $a_H \geq 210$ Дж/см².

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

$$800 \leq \sigma_B \leq 820^* \text{ МПа},$$

$$210 \leq a_H \leq 220^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.14. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ_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

Г.15. Завдання для варіанта № 15

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_T і відносного видовження δ :

$$G_T = f_1(C, T_{від}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{від}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$650 \leq \sigma_T \leq 690^* \text{ МПа},$$

$$18 \leq \delta \leq 20^* \text{ \%}.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.15. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _T , МПа			δ, %		
			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

Г.16. Завдання для варіанта № 16

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_в і відносного видовження δ:

$$\sigma_{\sigma} = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень границі міцності σ_в і відносного видовження δ ≥ 23 %.

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

$$640 \leq \sigma_{\text{в}} \leq 700^* \text{ МПа},$$

$$11 \leq \delta \leq 19^* \text{ \%}.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.16. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ _в , МПа			δ, %		
			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

Г.17. Завдання для варіанта № 17

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі межі текучості σ_T і відносного звуження φ :

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\varphi = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T і відносного звуження $\varphi \geq 67\%$.

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

$$430 \leq \sigma_T \leq 510^* \text{ МПа},$$

$$65 \leq \varphi \leq 75^* \%.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.17. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	σ_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	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

Г.18. Завдання для варіанта № 18

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

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з ціллю досягнення поєднання максимальних значень межі текучості σ_T та ударної в'язкості $a_H \geq 240$ Дж/см².

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

$$690 \leq \sigma_T \leq 710^* \text{ МПа},$$

$$200 \leq a_H \leq 220^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.18. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	T _{від} , °C	σ_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

Г.19. Завдання для варіанта № 19

1. За наведеними експериментальними даними побудувати математичні моделі границі міцності σ_B і ударної в'язкості a_H :

$$\sigma_B = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$a_H = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

2. Оптимізувати вміст вуглецю і температуру відпуску сталі з метою досягнення поєднання максимальних значень границі міцності σ_B і ударної в'язкості $a_H \geq 200$ Дж/см².

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

$$810 \leq \sigma_B \leq 830^* \text{ МПа},$$

$$200 \leq a_H \leq 220^* \text{ Дж/см}^2.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.19. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$\sigma_B, \text{МПа}$			$a_H, \text{Дж/см}^2$		
			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

Г.20. Завдання для варіанта № 20

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

$$\sigma_T = f_1(C, T_{\text{від}}),$$

$$\delta = f_2(C, T_{\text{від}}).$$

Перевірити адекватність моделей.

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

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

$$635 \leq \sigma_T \leq 680^* \text{ МПа},$$

$$17 \leq \delta \leq 23^* \text{ \%}.$$

* В разі необхідності потрібно коригувати задані границі.

Таблиця Г.20. Вихідні дані для розрахунків

№	C, %	$T_{\text{від}}, ^\circ\text{C}$	$\sigma_T, \text{МПа}$			$\delta, \text{\%}$		
			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. КОМП'ЮТЕРНІ ПРОГРАМИ ДЛЯ ПРАКТИКУМУ №2

' Multi-criteria optimization - №1 ' for 2 responses

CLS

N = 7000
DIM Y1(N), Y2(N)
DIM x1(N), x2(N)

' Limits of change of factors
x1n = 2: x1k = 3
x2n = 1: x2k = 2

' Optimization conditions
' Y1--> MAX
Y2n = 20

' Model 1 coefficients
a0 = .6519903#
a1 = -2.525944E-02
a2 = -7.966582E-02
a3 = 0
a4 = 0
a5 = 5.198497E-03

' Model 2 coefficients
b0 = .6519903#
b1 = -2.525944E-02
b2 = -7.966582E-02
b3 = 0
b4 = 0
b5 = 5.198497E-03

i = 0

FOR z1 = x1n TO x1k STEP .1
FOR z2 = x2n TO x2k STEP .1
i = i + 1
x1(i) = z1
x2(i) = z2

Y = a0 + a1 * x1(i) + a2 * x2(i) + a3 * x1(i) * x2(i)
Y1(i) = Y + a4 * x1(i) ^2 + a5 * x2(i)^2

```

        Y = b0 + b1 * x1(i) + b2 * x2(i) + b3 * x1(i) * x2(i)
        Y2(i) = Y + b4 * x1(i) ^2 + b5 * x2(i)^2
        PRINT i,

    NEXT z2
NEXT z1
PRINT : PRINT : PRINT

W = i

k1 = 1
' Finding the maximum of model 1
10  m1 = Y1(1)
    m2 = 1
    FOR i = 2 TO W
        IF Y1(i) > m1 THEN m2 = i: m1 = Y1(i)
    NEXT i

    ' Checking the condition for Y2
    IF Y2(m2) >= Y2n THEN GOTO 20: PRINT "---> 20"
    IF k1 = W THEN
        PRINT "The desired point does not exist"
        SLEEP
        STOP
    END IF

    PRINT k1,
    Y1(m2) = 0
    k1 = k1 + 1
    GOTO 10

    ' Displaying search results
20  PRINT : PRINT
    PRINT " Y1-----Y2"
    PRINT Y1(m2), Y2(m2)
    PRINT "x1="; .01 * INT(100 * x1(m2) + .5)
    PRINT "x2="; .01 * INT(100 * x2(m2) + .5)
    PRINT : SLEEP

END

```

' Multi-criteria optimization - №2 for 2 responses

CLS

' Limits of change of factors

x1n = 1: x1k = 7

x2n = 1: x2k = 7

' Desirable limits Y

Y1n = .55: Y1v = .62: '> Limit Y1

Y2n = 20: Y2v = 25: '> Limit Y2

' Model 1 coefficients

a0 = .6519903#

a1 = -2.525944E-02

a2 = -7.966582E-02

a3 = 0

a4 = 0

a5 = 5.198497E-03

' Model 2 coefficients

b0 = .6519903#

b1 = -2.525944E-02

b2 = -7.966582E-02

b3 = 0

b4 = 0

b5 = 5.198497E-03

FOR z1 = x1n TO x1k STEP .5

FOR z2 = x2n TO x2k STEP .5

x1 = z1

x2 = z2

Y = a0 + a1 * x1 + a2 * x2 + a3 * x1 * x2

Y1 = Y + a4 * x1^2 + a5 * x2^2

Y = b0 + b1 * x1 + b2 * x2 + b3 * x1 * x2

Y2 = Y + b4 * x1^2 + b5 * x2^2

' Checking the condition for Y2

IF Y1 < Y1n OR Y1 > Y1v THEN

PRINT "-->1"

GOTO 10

END IF

' Checking the condition for Y2

IF Y2 <= Y2n OR Y2 >= Y2v THEN

PRINT "-->2"

GOTO 10

END IF

' Displaying search results

PRINT " Y1-----Y2"

PRINT Y1, Y2

PRINT "x1="; .01 * INT(100 * x1 + .5)

PRINT "x2="; .01 * INT(100 * x2 + .5)

PRINT : SLEEP

10 zzz = 1

NEXT z2

NEXT z1

END