

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
“Київський політехнічний інститут”

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ ТА
ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ПРОЦЕСІВ В МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

Методичні вказівки
до виконання комп'ютерного практикуму

Київ – 2016

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
“Київський політехнічний інститут”

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ ТА
ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ПРОЦЕСІВ В МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

Методичні вказівки
до виконання комп’ютерного практикуму

Затверджено Методичною радою НТУУ «КПІ»

Київ
НТУУ «КПІ»
2016

Математичне моделювання матеріалів та технологічних процесів в матеріалознавстві [Текст] : методичні вказівки до виконання комп'ютерного практикуму для студ. спец. Металознавство / Уклад.: О.М.Доній, А.А.Кулініч, С.М. Котляр, О.І. Дудка. – К.: НТУУ «КПІ», 2016. - 106 с.

*Гриф надано Методичною радою НТУУ «КПІ»
(Протокол № 09/11 від 23.09.2015 р.)*

Навчальне видання

Математичне моделювання матеріалів та технологічних процесів в матеріалознавстві

Методичні вказівки
До виконання комп'ютерного практикуму
для студентів спеціальності
“Металознавство”

Укладачі: Доній Олександр Миколайович, канд. техн. наук, доц.
Кулініч Андрій Альбертович, канд. техн. наук, доц.
Котляр Сергій Миколайович, асист.
Дудка Олександр Іванович, канд. техн. наук, доц.

Відповідальний редактор, Зауличний Ярослав Васильович докт. фіз.-мат. наук, доц.

Рецензент Степанов Олег Васильович, канд. техн. наук, доц.

*За редакцією укладачів
Надруковано з оригінал-макета замовника*

Зміст

Вступ	5	
Комп'ютерний практикум №1	Нагрівання металевого виробу в печі для наступної термічної обробки – 1	6
Комп'ютерний практикум №2	Нагрівання металевого виробу в печі для наступної термічної обробки – 2	11
Комп'ютерний практикум №3	Нагрівання металевого виробу в печі для наступної термічної обробки – 3	22
Комп'ютерний практикум №4	Ідентифікаційні математичні моделі. Метод найменших квадратів	33
Комп'ютерний практикум №5	Симплекс-загратований й плановий експеримент для побудови моделі “склад-властивості” сплаву системи Al-Mg-Zn	43
Комп'ютерний практикум №6	Оптимізація режимів зміцнюючої обробки сталі з використанням факторних планів першого та другого порядків	51
Комп'ютерний практикум №7	Оптимізація режимів термічної обробки нержавіючої мартенситно-старіючою сталі з використанням планів Бокса-Бенкена	62
Комп'ютерний практикум №8	Багатокритеріальна оптимізація методом послідовних поступок	72
Комп'ютерний практикум №9	Імітаційне моделювання складних систем. Імітаційна модель кристалізації чистого металу	78
Комп'ютерний практикум №10	Імітаційне моделювання складних систем. Імітаційна модель кристалізації бінарних сплавів	89
Додатки	105	

Вступ

В методичних вказівках представлено цикл комп'ютерних практикумів, покликаних допомогти студентам у вивченні методів математичного моделювання та оптимізації, які можна використовувати у їхній подальшій науково-технічній діяльності для удосконалення існуючих і розробки нових матеріалів та процесів.

Розглянуто основні підходи до створення математичних моделей різних типів як аналітичних, так і чисельних. Певну увагу приділено методу найменших квадратів для обробки експериментальних даних в регресійному аналізі. Показано приклади застосування ряду методів оптимізації одновимірних та багатовимірних. Розглянуто практично важливий випадок багатокритеріальної оптимізації. На прикладі процесу кристалізації металів і сплавів розглянуто відносно молодому методу моделювання складних систем – створенню імітаційних моделей.

Для виконання лабораторних практикумів необхідно:

- IBM сумісний персональний комп'ютер класу 486DX40 (або краще), який працює під управлінням операційної системи MS-DOS 6.0 (або краще) або комп'ютер класу Pentium 100 (або краще) з операційною системою MS Windows 95 (98, 2000, XP) та встановленим пакетом MS Office 97 (200, XP, 2003);

- протокол відповідного комп'ютерного практикуму.

АНАЛІТИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ В ПЕЧІ ДЛЯ НАСТУПНОЇ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ

Мета роботи: освоєння принципів побудови детермінованої аналітичної математичної моделі із зосередженими параметрами та визначення часу нагріву металевого виробу.

Теоретичні відомості

Нагрів металевих виробів та заготовок до певної температури як технологічну операцію широко застосовують у виробництві при подальшій термічній обробці. Наприклад при гартуванні деталь необхідно нагріти до визначеної температури, що залежить від матеріалу, з якого вона виготовлена. “Недогрів” чи “перегрів” виробу (в останньому випадку часто користуються терміном "перепал зерна"), що піддається даному виду термічної обробки, приводить до зниження рівня необхідних механічних властивостей майбутньої деталі. Крім того, перегрів спричиняє і непотрібні енергетичні витрати. Для визначення часу нагріву металевого виробу можна використати математичну модель.

Будемо розглядати випадок, коли можна припустити, що перепад (градієнт) температури по перетину виробу малий і заготовок має вигляд валу, тобто виробу циліндричної форми, у якого довжина l значно перевищує радіус r_0 ($r_0 \ll l$). Це дозволяє виключити з математичної задачі просторові координати. Вочевидь, неоднорідність внутрішньої структури звичайного матеріалу деталі (наприклад сталі) не буде грати істотної ролі в процесі нагріву і тому будемо вважати матеріал ізотропним. Таким чином, заготовку можна представити у виді "матеріальної точки", що володіє деякою масою m , визначеними теплофізичними характеристиками і площею поверхні S , але не має просторових координат. Площа поверхні відіграє важливу роль, тому що саме через неї здійснюється теплообмін. Простір печі можна розглядати як зовнішнє середовище, що оточує вал, з температурою T_{sp} . Теплопередача від навколишнього середовища до тіла, що нагрівається (теплообмін), здійснюється або конвекцією, або за рахунок випромінювання (радіації). У такий спосіб можна побудувати математичну модель нагрівання валу під гартування, використовуючи відомі феноменологічні закони Ньютона-Рихмана (конвекція) і Стефана-Больцмана (випромінювання).

Основним співвідношенням математичної моделі є рівняння балансу енергії: зміна внутрішньої енергії заготовки dQ_c дорівнює кількості тепла тіла, що поглинається від печі dQ_p , тобто

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

Будемо вважати, що теплообмін валу з простором печі відбувається за законом конвективного теплообміну Ньютона-Рихмана, тобто променевим теплообміном зневажаємо. Це спрощення також робить об'єкт моделювання більш ідеалізованим, хоча, строго говорячи, справедливність його залежить від температури печі T_p і ступеня чорноти поверхні виробу. Тоді у відповідності до закону Ньютона-Рихмана:

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

де: $T(t)$ - температура заготовки під час нагрівання α - коефіцієнт тепловіддачі від простору печі до поверхні валу; S - площа поверхні виробу; t - час.

Зміну внутрішньої енергії валу можна записати, використовуючи відоме калориметричне співвідношення:

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

де: c - питома теплоємність металу; m - маса металу.

Підставляючи вирази (1.2) і (1.3) у рівняння (1.1), після елементарних перетворень одержимо рівняння теплового балансу в наступному виді:

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

Маса заготовки в процесі нагрівання не змінюється, а незначною зміною розмірів поверхні, що пов'язано з розширенням тіла при підвищенні температури, можна знехтувати.

Відомо, що теплоємність матеріалів залежить від температури, однак для спрощення задачі приймемо її постійною, тобто $c = const$. Коефіцієнт тепловіддачі α також будемо вважати постійним.

Вираз (1.4) являє собою диференціальне рівняння першого порядку з постійними коефіцієнтами і є диференціальною математичною моделлю однофакторного процесу, що виражає швидкість зміни єдиного вихідного відгуку (температури) $\frac{dT(t)}{dt}$ через її параметри. Зокрема, з (1.4) випливає, що швидкість нагрівання $\frac{dT(t)}{dt}$ має максимальну величину на початку процесу, коли $T = T_0$, і зменшується в часі із підвищенням температури заготовки $T(t)$ (при інших постійних величинах). Крім того, якщо масу деталі представити через її густину і об'єм, тобто як $m = \rho V$, то, очевидно, що швидкість

нагрівання залежить від комплексного геометричного параметра $\frac{S}{V}$, який залежить не тільки від розмірів, але і від конфігурації виробу. Подібний аналіз можна було б продовжити і він надає корисну інформацію, навіть якщо диференціальна модель не інтегрується простим образом.

Для одержання інтегральної моделі рівняння (1.4) перепишемо в наступному вигляді:

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

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 шляхом безпосереднього інтегрування лівої і правої частини рівності (1.5). Після урахування граничної умови (1.6) одержимо математичне формулювання

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

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

Вираз (1.7) є інтегральною моделлю процесу нагріву при прийнятих обмеженнях і спрощеннях. Дане рівняння дає наближений аналітичний опис кінетики процесу нагрівання за умови достатньо обґрунтованих припущень у постановці задачі. Деякі неточності, що властиві даній моделі, можна легко обійти, якщо не потрібна підвищена точність розрахунків. Наприклад, аналіз виразу (1.7) показує, що в процесі нагрівання температура заготовки $T(t)$ поступово наближається до температури печі T_p , тому що при збільшенні часу нагрівання t експонента зменшується. Але формальна рівність $T(t) = T_p$ виконується коли експонента асимптотично наближується до нуля ($\exp(-kt) \rightarrow 0$), а час процесу наближується до нескінченності, тобто при $t = \infty$ (рис. 1). Інакше кажучи температура заготовки досягне температури печі в процесі нескінченного довгого нагрівання. Така, дещо абсурдна ситуація виникає як наслідок припущень і спрощень, які були зроблені при формуванні ідеального об'єкта. А саме йому відповідає математичне формулювання моделі. В той же час, практика показує, що температури вирівнюються за кінцевий проміжок часу. Вихід з цієї ситуації дуже простий. Якщо потрібно розрахувати

час нагрівання t_n , то, за допомогою математичної моделі (1.7), визначасмо t_n у момент коли

$$T(t) = BT_p, \quad (1.9)$$

де $B = (1 - 0,01\Delta)$ - коефіцієнт, який обумовлений точністю виміру температури в печі. Якщо температура визначається з похибкою $\Delta = 5\%$, то $B = 0,95$.

Сенс (1.9) полягає в тому, що вимірювання температури в печі завжди виконується з певною точністю і не має потреби вести розрахунки часу нагріву t_n саме до T_p , а достатньо досягти межі $T_k = T_p - 0,01\Delta \times T_p$ або BT_p . Таким чином нескінченний “хвіст” експоненти, який прямує асимптотично до T_p , “відрізається” (рис. 1.1).

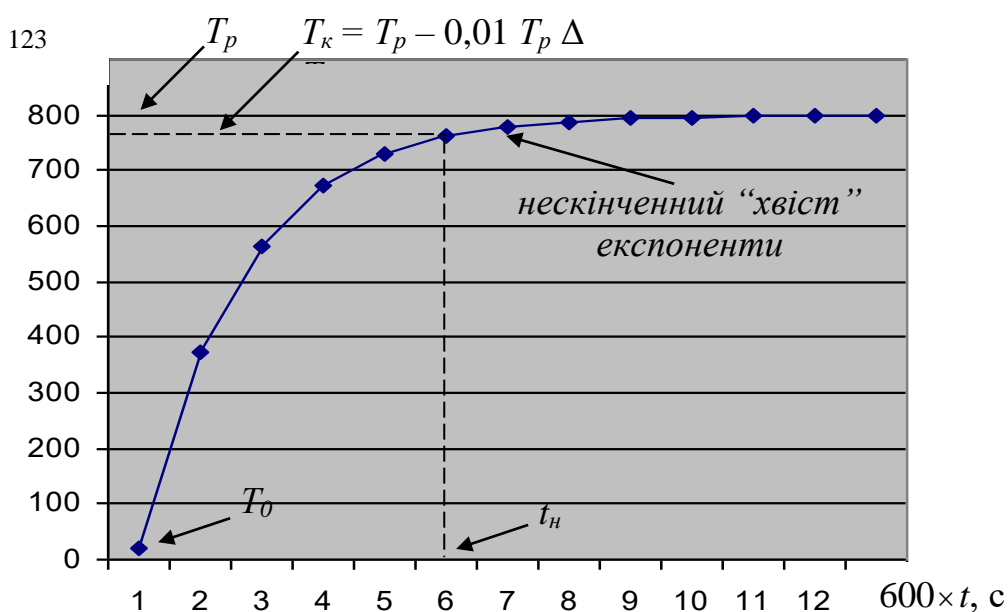


Рис. 1.1 Зміна температури заготовки $T(t)$ із часом нагріву t . T_p – температура печі, $^{\circ}\text{C}$; T_0 – початкова температура, $^{\circ}\text{C}$; Δ - похибка вимірювання температури, %; T_k – температура закінчення розрахунків; t_n – час нагріву, с.

Наприклад: температура печі $T_p = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($1073\text{ }^{\circ}\text{K}$), початкова температура $T_0 = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($293\text{ }^{\circ}\text{K}$), коефіцієнт $k = 10^{-3}\text{ c}^{-1}$, похибка вимірювання температури $\Delta = 5\%$ (всі розрахунки потрібно виконувати в системі СІ). Потрібно за допомогою математичної моделі (1.7) розрахувати час нагріву заготовки t_n .

Спочатку визначимо температуру кінця розрахунків $T_k = BT = 0,95 \times 800\text{ }^{\circ}\text{C} = 760\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($1033\text{ }^{\circ}\text{K}$). Потім перетворимо вираз (1.7) таким чином, щоб виділити з нього час t_n . Для цього замість $T(t)$ підставляємо T_k , логарифмуємо обидві частини (1.7) і після нескладних перетворень одержимо

$$t_n = -\frac{1}{k} \ln \left(\frac{T_p - T_k}{T_p - T_0} \right). \quad (1.10)$$

Підставляючи в (1.11) всі числові дані отримуємо

$$t_n = -\frac{1}{0,001} \ln \left(\frac{1073 - 1033}{1073 - 293} \right) \cong 3000 \text{ с.}$$

Таким чином час нагріву для даного прикладу складає приблизно 3000 секунд або 50 хвилин.

Завдання комп'ютерного практикуму

Розрахувати час нагріву заготовки t_n , яка нагрівається в печі та побудувати графік залежності температури від часу в процесі нагрівання. Розрахунки провести використовуючи для цього детерміновану, інтегральну, аналітичну математичну модель із зосередженими параметрами (1.7) - (1.8) та формулу (1.10). Дані для розрахунків наведені в таблиці 1.1.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Провести розрахунок коефіцієнта k за формулою (1.8). Для цього потрібно визначити значення питомої теплоємності в середині температурного інтервалу нагрівання, площу поверхні металеві заготовки та її масу.

Значення густоти для Al та Cu, а також залежності їх питомої теплоємності від температури ($c = f(T)$) наведено в таблиці 1.2. По даним таблиці 1.2 будується лінійна апроксимація залежності $c = f(T)$ використовуючи відоме рівняння прямої, яка проходить через дві точки:

$$\frac{c - c_1}{c_2 - c_1} = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}, \quad (1.11)$$

де c_1, c_2, T_1 та T_2 – значення відповідно питомої теплоємності та температури з таблиці 1.1.

Після підстановки числових значень в рівняння (1.11) воно зводиться до вигляду:

$$c = a_0 + a_1 T, \quad (1.12)$$

де a_0 та a_1 – коефіцієнти.

Середня величина питомої теплоємності визначається шляхом підстановки середнього значення інтервалу температур в (1.12).

Маса заготовки визначається як добуток густини ρ та об'єму V :

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

Площа поверхні заготовки та її об'єм визначаються за відомими співвідношеннями в залежності від її геометрії (таблиця 1.3).

2. Визначити температуру закінчення розрахунків T_k , як зазначено вище.
3. Розрахувати час нагріву, використовуючи вираз (1.11).
4. Побудувати графік процесу нагрівання, використовуючи математичну модель (1.7).
5. Сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити протокол виконання комп'ютерного практикуму.

Контрольні запитання

1. Які особливості мають математичні моделі із зосередженими параметрами?
2. Які математичні моделі називають аналітичними?
3. Які математичні моделі називають диференціальними та інтегральними?
4. Які припущення приймаються при побудові математичної моделі нагріву металевої заготовки?
5. Які рівняння і умови входять у задачу Коші при формулюванні математичної моделі в диференціальному вигляді?
6. Чому потрібно враховувати похибку вимірювання температури при розрахунках часу нагріву?

Література

1. Александров С. Е. и др. Математическое моделирование металлургических процессов. – Ленинград: Ленинградский политехнический институт. – 1988. - 86 с.

Таблиця 1.1

Параметри для розрахунку часу нагріву металевої заготовки
(комп'ютерний практикум №1)

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

Таблиця 1.2

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

c , [Дж·кг ⁻¹ ·К ⁻¹]		
T , [K]	Al ($\rho = 6,523$ г·см ⁻³)	Cu ($\rho = 8,873$ г·см ⁻³)
300	904	385
800	1154	442

Таблиця 1.3

Формули розрахунку площі поверхні і об'єму основних геометричних фігур

	“Плита”	“Циліндр”	“Шар”
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	$V = l_1 \cdot l_2 \cdot l_3$	$V = \pi \cdot r^2 \cdot l$	$V = \frac{4}{3}\pi \cdot r^3$

ЧИСЛОВА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ В ПЕЧІ ДЛЯ НАСТУПНОЇ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ

Мета роботи: освоєння принципів побудови детермінованої числової математичної моделі із зосередженими параметрами та визначення впливів залежності питомої теплоємності від температури і випромінювання на процес нагріву металевго виробу.

Теоретичні відомості

Якщо лінійна детермінована, аналітична математична модель із зосередженими параметрами (дивись комп'ютерний практикум №1) виявилась неадекватною варто повернутися до аналізу зроблених при її побудові припущень. Наприклад, температура нагрівання під гартування залежить від матеріалу виробу і для сталі знаходиться в межах 1000 град. С. Теплоємність сталі змінюється на 20 - 30% в інтервалі температур 20 - 1000 градусів Цельсію. При високих температурах істотна частка тепла передається шляхом випромінювання. Тому підвищення точності моделі може вимагати врахування залежності питомої теплоємності від температури $c = f(T)$ і радіаційної тепловіддачі (закон Стефана-Больцмана).

Залежність теплоємності від температури $c = f(T)$ звичайно описують за допомогою апроксимації експериментальних даних. Однією з найбільш популярних є апроксимація степеневим поліномом. На практиці дуже часто достатньо вже його другого ступеня, який формує нелінійну (квадратичну) емпіричну функцію. В даній роботі для спрощення використовується лінійна апроксимація:

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

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

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

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

де: σ - постійна Стефана-Больцмана; $0 < \varepsilon < 1$ - ступінь чорноти поверхні заготовки.

Рівняння теплового балансу із початковою умовою в цьому випадку приймає наступний вид:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{k_1[T_p - T(t)] + k_2[T_p^4 - T^4(t)]}{a_0 + a_1T(t)}, \quad (2.3)$$

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

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

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

Вираз (2.3) класифікується як нелінійне диференціальне рівняння. Воно значно повніше описує систему, що досліджується, однак одержати його аналітичний розв'язок досить важко (якщо взагалі можливо). Навіть якщо це вдасться, то можна чекати, що кінцева формула буде занадто громіздкою, що мало підходить для її практичного використання. Тому при створенні нелінійних математичних моделей для розв'язання математичних задач використовують, в основному, чисельні методи.

Найпростішим методом розв'язку для звичайного диференційного рівняння першого порядку є метод Ейлера, який полягає в наступному. Задача Коші для звичайного диференційного рівняння першого порядку формулюється наступним чином:

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

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

Оскільки рішенням диференціального рівняння є функція, то при чисельному його розв'язку вона повинна мати табличний вигляд. Для цього необхідно вказати інтервал $[x_0, x_N]$ по x , на якому бажано визначити поведінку розв'язку, і крок $h = \text{const}$, з яким буде змінюватись аргумент x на цьому інтервалі. Тобто потрібно побудувати таблицю 2.1:

Таблиця 2.1

Чисельний розв'язок диференціального рівняння у табличному вигляді

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

Причому перший рядок таблиці 2.1 вже відомий. Початкова точка з номером $i = 0$ є додатковою умовою (2.8) в задачі Коші.

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

Запишемо ряд Тейлора для малої ε -околиці точки x_0 :

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

В знаменниках коефіцієнтів виразу (2.9), що розташовані перед похідними, знаходиться факторіал – функція, значення якої 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):

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

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

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

$$y(x_0 + \varepsilon) = y(x_0 + h) = y(x_1) = y_1. \quad (2.12)$$

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

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

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

Повторюючи ці дії відносно точки x_1 аналогічним образом можна отримати:

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

або в загальному вигляді:

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

Загальна ітераційна формула (2.15) для чисельного розв'язку задачі (2.7) – (2.8) дозволяє по відомим значенням аргументу x_i і функції y_i на i -тому кроці знайти значення функції y_{i+1} на наступному $i+1$ -ому. Тобто таким чином розраховуються значення функції у всіх точках таблиці 2.1, яка і є розв'язком задачі Коші.

В даному випадку ітераційна формула для рівняння (2.3) має загальний вигляд:

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

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

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

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

Таблиця 2.2

Чисельний розв'язок диференціального рівняння (2.3) у табличному вигляді

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

Тут перший рядок є додатковою умовою (2.4).

Наведемо приклад розв'язку задачі (2.3) – (2.4) методом Ейлера. Припустимо, що діаметр заготовки, що нагрівається, $D = 3$ см, а її довжина $l = 1$ м. Тоді не важко обчислити його поверхню $S = 2\pi Rl + 2\pi R^2$ або $S \approx 0,095$ м² і об'єм $V = \pi R^2 l$ чи $V \approx 7,069 \cdot 10^{-4}$ м³. Заготовка зроблена зі сталі, густина якої $\rho = 7870 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, і його маса m складає $m = \rho V \approx 5,56$ кг, а ступінь чорноти поверхні $\varepsilon = 0,5$. Нагрів починається від 20 °С (або 293 °К), температура печі 1000 град °С (або 1273 °К), похибка вимірювання температури $\Delta = 5\%$. Тоді температура закінчення розрахунків 995 °С (або 1268 °К), що визначається таким же чином як в прикладі із аналітичною моделлю. Постійна Стефана-Больцмана $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Дж·с⁻¹·м⁻²·К⁻⁴, коефіцієнт тепловіддачі $\alpha = 10$ Дж·с⁻¹·м⁻²·К⁻⁴. Тоді числові значення коефіцієнтів k_1 , k_2 у відповідності до (2.5) та (2.6) будуть: $k_1 = 0,172$ Дж·с⁻¹·кг⁻¹·К⁻¹, а $k_2 = 4,875 \cdot 10^{-10}$ Дж·с⁻¹·кг⁻¹·К⁻⁴.

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

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

Ітераційна формула (2.17) приймає вигляд:

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

Для обчислень виберемо крок за часом $h = 10$ секунд. Значення функції $T(t)$, які обчислюються за допомогою виразу (2.19), заносяться в таблицю 2.3. У перший стовпчик таблиці заноситься номер ітерації, у другий - час нагрівання. Третій і четвертий стовпчики містять температуру зразка, що нагрівається, відповідно, у градусах Кельвіна і Цельсія. Значення температури в розрахунку по (2.19) використовуються з третього стовпчика, а четвертий - служить для ілюстрації динаміки нагрівання у більш звичному вигляді.

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

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

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

$$T_2 = 340 + 10 \frac{0,172[1273 - 340] + 4,875 \cdot 10^{-10}[1273^4 - 340^4]}{202,1 + 0,2143 \cdot 340}. \quad (2.21)$$

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

Таблиця 2.3

Розраховані значення температури заготовки в процесі його нагрівання

i	t, c	$T, ^\circ K$	$T, ^\circ C$
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

Точність розрахунків залежить від величини кроку за часом. Чим він менше, тим точніше будуть розрахунки.

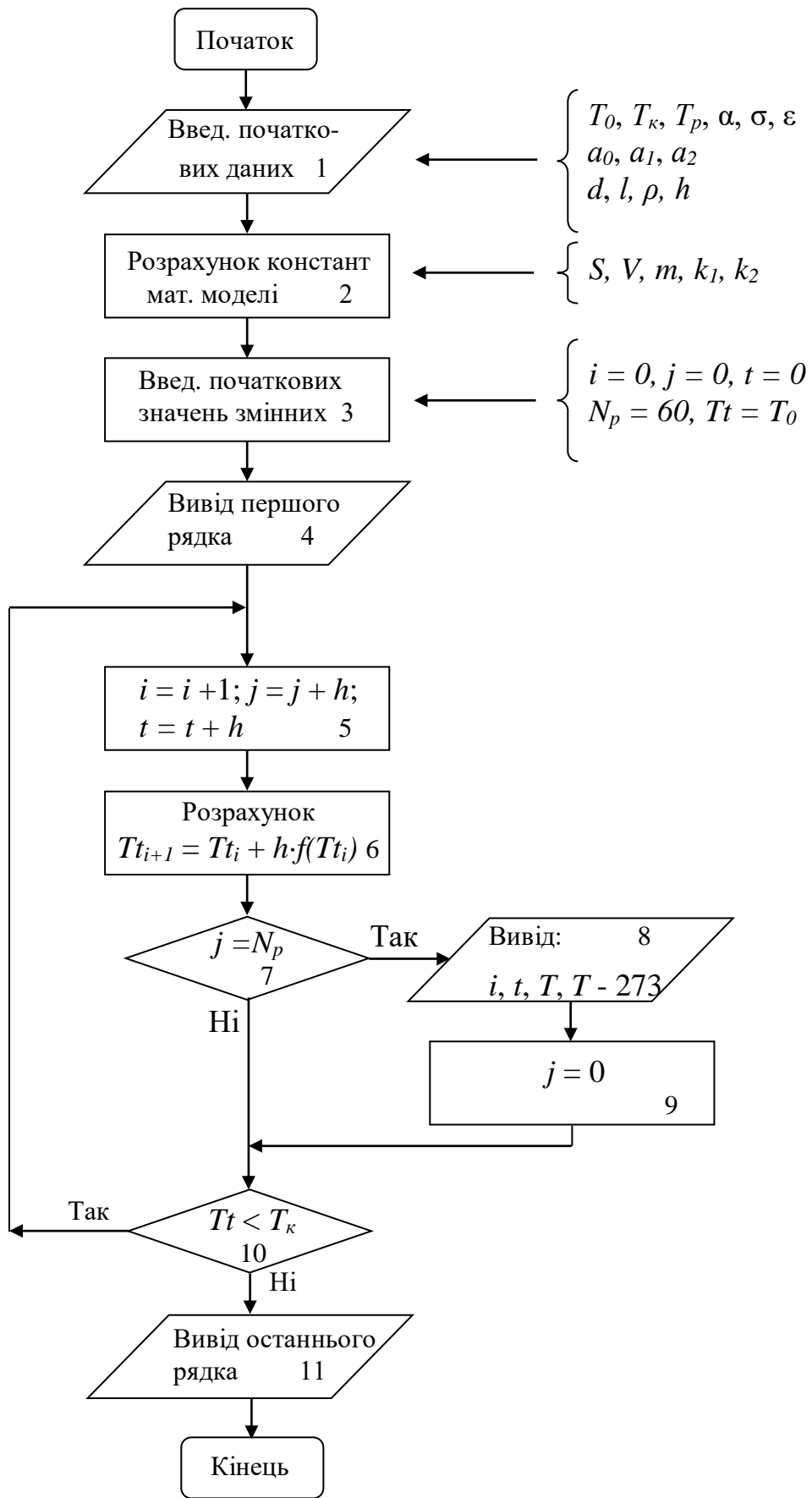


Рис. 2.1 Блок-схема алгоритму розрахунків числової, нелінійної математичної моделі із зосередженими параметрами

Звичайно подібні числові розрахунки із подібними математичними моделями зручно виконувати на ЕОМ з допомогою комп'ютерних програм.

На рис. 2.1 приведений алгоритм числового розв'язання задачі (2.3) – (2.4) про нагрівання заготовки для термічної обробки. У ньому передбачено послідовне (із кроком h) обчислення температури $T(t)$ по методу Ейлера відповідно до виразу (2.18) із закінченням обчислень після досягнення заданої кінцевої температури T_k . В алгоритмі також передбачено розрахунок операційних констант (S, V, m, k_1, k_2).

У блок 1 вводяться вхідні дані для розрахунку: температури початкова (T_0), печі (T_p), кінця розрахунку (T_k); теплофізичні характеристики - коефіцієнт тепловіддачі (α), постійна Стефана-Больцмана (σ), ступінь чорноти поверхні (ε), густина матеріалу валу (ρ); коефіцієнти апроксимації (a_0, a_1); геометричні розміри – в залежності від геометрії заготовки (довжина (l_1), ширина (l_2) і висота (l_3) заготовки, або її діаметр (d) і довжина (l), або діаметр (d)); крок розрахунку за часом (h).

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

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

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

У блоці 5 відбувається збільшення лічильників. Сам розрахунок, відповідно до виразу (2.18) відбувається в блоці 6.

Умова перевірки необхідності виводу результатів розрахунку перевіряється в блоці 7. Це зроблено для того, щоб не одержувати при розрахунках занадто великий обсяг вихідної інформації. На екран (або на принтер) виводяться не всі точки, що розраховувались, а із деяким інтервалом. Якщо часовий лічильник j збігається з N_p , то виводиться рядок (блок 8), у якому присутні номер ітерації i , час нагрівання t , температура валу в градусах Кельвіна й у градусах Цельсія. Також скидається на нуль часовий лічильник ($j = 0$, блок 9) і управління передається на блок 10. У протилежному випадку блоки 8 і 9 не задіюються і управління відразу переходить у блок 10. У блоці 10 перевіряється умова закінчення розрахунків. Якщо обчислене значення температури (Tt) не досягло температури закінчення розрахунків (T_k), то управління передається в блок 5.

При не виконанні умови $Tt < T_k$ виводяться останні розраховані значення й обчислення припиняються.

Правильність роботи програми (після усунення синтаксичних помилок) **обов'язково перевіряється** на так званому “**контрольному прикладі**”. У даному випадку контрольним прикладом можуть служити результати, які отримані в комп'ютерному практикумі №1. Для порівняння результатів, що отримані за допомогою аналітичної і чисельної моделей, досить вибрати коефіцієнт ступеня чорності поверхні ε рівним нулю, що усуне радіаційну складову передачі тепла, і апроксимацію температурної залежності теплоємності замінити її середнім значенням у діапазоні від початкової температури до температури печі $c_{\text{ср}}$, тобто $a_0 = c_{\text{ср}}$, $a_1 = 0$.

Завдання комп'ютерного практикуму

Розрахувати час нагріву заготовки t_n , яка нагрівається в печі та побудувати графік залежності температури від часу в процесі нагрівання. Розрахунки провести використовуючи ітераційну формулу чисельної математичної моделі із зосередженими параметрами (1.17). Дані для розрахунків задані в комп'ютерному практикумі №1. Розрахунки провести при наступних умовах:

1. $a_0 = c$, [Дж·кг⁻¹·К⁻¹] (значення c розраховано в комп'ютерному практикумі №1); $a_1 = 0$; $\varepsilon = 0$. В цьому випадку розрахунки можна порівняти з результатами, які отримані в комп'ютерному практикумі №1. Тобто можна порівняти значення температур, які отримані з допомогою аналітичної і числової моделі процесу нагріву.

2. $a_0 \neq 0$; $a_1 \neq 0$ (значення a_0 та a_1 розраховані в комп'ютерному практикумі №1); $\varepsilon = 0$. В цьому випадку розрахунки показують вплив залежності питомої теплоємності від температури на динаміку процесу нагріву.

3. $a_0 \neq 0$; $a_1 \neq 0$ (значення a_0 та a_1 розраховані в комп'ютерному практикумі №1); $\varepsilon = 0,7$. В цьому випадку розрахунки показують вплив залежності питомої теплоємності від температури та врахування нагріву шляхом випромінювання на динаміку процесу нагріву.

Побудувати графіки для трьох варіантів розрахунків і порівняти їх між собою та із результатами, що отримані в комп'ютерному практикумі №1.

Оператори мови QBasic, які необхідні для програмної реалізації алгоритму на рисунку 2.1:

CLS – очистка екрану;

DATA - завдання числових даних;

READ - зчитування числових даних;

INPUT – введення числових даних з клавіатури;

PRINT - вивід інформації на екран;
GOTO (10) – безумовний перехід на позначену мітку;
IF Умова THEN Оператор 1 ELSE Оператор 2 – оператор умови. Якщо “Умова” виконується, то працює “Оператор 1”, якщо ні, то працює “Оператор 2”

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Проаналізувати алгоритм числового розв'язання задачі (2.3) – (2.4) про нагрівання заготовки для термічної обробки та скласти комп'ютерну програму, що його реалізує, на мові QBasic (або іншій за бажанням студента).
2. Перевірити правильність комп'ютерної програми на контрольному прикладі.
3. Провести розрахунки за пунктами 1, 2 та 3 завдання, використовуючи розроблену комп'ютерну програму. Рекомендований крок розрахунків $h = 1$ секунда.
4. Побудувати графіки процесу нагрівання, використовуючи отримані результати розрахунків.
5. Проаналізувати отримані результати та сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити протокол виконання комп'ютерного практикуму.

Контрольні запитання

1. Які фізичні механізми і закони існують при передачі тепла?
2. Які математичні труднощі виникають при врахуванні в математичній моделі залежності питомої теплоємності від температури та механізму передачі тепла випромінюванням?
3. Що лежить в основі методу Ейлера для розв'язку звичайних диференціальних рівнянь першого порядку?
4. Від чого залежить точність розрахунків методом Ейлера для розв'язку звичайних диференціальних рівнянь першого порядку?

Література

1. Мудров А.Е. Численные методы для ЭВМ на языках Бэйсик, Фортран и Паскаль. – Томск: МП «РАСКО», 1991. – 272 с.
2. В.Е.Зиновьев. Теплофизические свойства материалов при высоких температурах. Справочник. М., Металлургия. – 1989.- 383 с.

НАГРІВАННЯ МЕТАЛЕВОГО ВИРОБУ В ПЕЧІ ДЛЯ НАСТУПНОЇ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ – 3

Мета роботи: освоєння принципів побудови детермінованої числової математичної моделі із розподіленими параметрами та визначення часу нагріву металевого виробу.

Теоретичні відомості

При математичному моделюванні процесу нагрівання зразка для подальшої термічної обробки принципове значення має його геометрія. Якщо не виконується співвідношення $r_0 \ll l$ (або радіус занадто великий, або довжина замала), то потрібно будувати модель із розподіленими параметрами. Тобто таку, в якій враховуються внутрішні координати системи. Теплові процеси в системах з розподіленими параметрами описуються “*рівнянням в частинних похідних параболічного типу*”, яке, в даному випадку, називається “*рівнянням Фур'є*”.

Якщо припустити, що матеріал, з якого зроблено заготовку циліндричної форми ізотропний і в ньому не має ні фазових перетворень, ні хімічних реакцій з виділенням або поглинанням тепла, то розподіл температури по радіусу r і за часом t описується рівнянням Фур'є, яке має вигляд:

$$\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = a \left[\frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T(r,t)}{\partial r} \right]. \quad (3.1)$$

$$a = \frac{\lambda}{c\rho}, \quad (3.2)$$

де a – коефіцієнт температуропровідності, який вважається постійним; λ – коефіцієнт температуропровідності; ρ – густина; c – питома теплоємність; $T(r, t)$ – температура; r – радіус вектор; t – час.

Розв'язок рівнянь параболічного типу включає в собі три константи, які підлягають ідентифікації. Для цього використовують початкову умову, що вказує початковий розподіл температури у часі, а також граничні умови, що включають у собі геометрію задачі.

В даному випадку початок процесу починається з того моменту, коли заготовки потрапили в нагріту піч. Перед цим вони, швидше за все, знаходились певний час в цеху при постійній температурі, яку можна позначити T_0 :

$$T(r,0) = T_0 = const. \quad (3.3)$$

В якості граничної умови на поверхні заготовки доцільно вибрати умови 3-го роду (як найбільш універсальні):

$$-\lambda \frac{\partial T(r_0, t)}{\partial r} = \alpha [T(r_0, t) - T_p], \quad (3.4)$$

де T_p – температура печі; r_0 – радіус заготовки (циліндру).

Для точки з координатою $r_0 = 0$, яка є внутрішньою центральною точкою системи, градієнт температур дорівнює нулю:

$$-\lambda \frac{\partial T(0, t)}{\partial r} = 0, \quad (3.5)$$

Таким чином при побудові математичної моделі процесу теплопровідності записують відповідне рівняння, початкову умову та дві граничні умови.

Розв'язати задачу (3.1) – (3.5) можна аналітично, використовуючи для цього, наприклад, метод Фур'є. Але на сьогодні, у зв'язку із широким поширенням обчислювальної техніки, все частіше дослідники і інженери застосовують при розв'язанні подібних задач числові методи.

Для числового розв'язання рівнянь у частинних похідних використовують метод кінцевих різниць. Метод побудовано на зміні частинних похідних їх апроксимаціями у вигляді різниць.

Функція $T(r, t)$, що є розв'язком математичної задачі (3.1) – (3.5), після використання числового методу буде мати вигляд таблиці, в якій координата r змінюється з постійним кроком h , а час t змінюється з постійним кроком τ . Таку функцію $T(r, t)$ прийнято у числових методах представляти у вигляді деякої сітки (рис. 3.1). Координата r розділяється на N частин з постійним кроком h і замість неперервних значень починає приймати дискретні:

$$r = hi, \text{ при } i = 0, 1, \dots, N. \quad (3.6)$$

Особливістю чисельного розв'язку диференціальних рівнянь є те, що потрібно вказати загальний час спостереження над системою, яка досліджується, t_n . Цей час розділяється на M частин з постійним кроком τ , а змінна часу з неперервної також стає дискретною:

$$t = \tau j, \text{ при } j = 0, 1, \dots, M. \quad (3.7)$$

Таким чином неперервна функція $T(r, t)$ стає дискретною $T(hi, \tau j)$, яка для зручності позначається як T_i^j , де i та j номери точок відповідно по r та t (не плутати j із степеневим індексом), і розв'язання задачі (3.1) – (3.5) зводиться до розрахунків температур в вузлах сітки.

Апроксимація частинних похідних у вигляді різниць описується формулами:

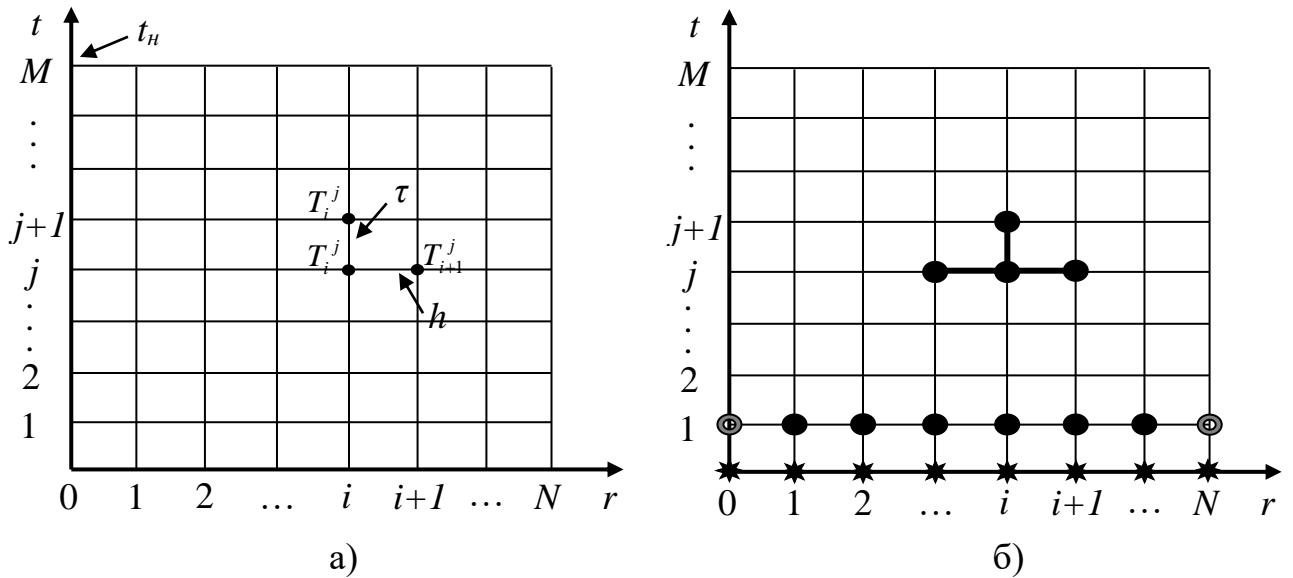


Рис. 3.1 Сіткова функція T_i^j , що є наближенням розв'язку $T(r, t)$ задачі (3.1) – (3.5):
 а) визначення апроксимації частинних похідних кінцевими різницями;
 б) розрахунок значень температур в вузлах сіткової функції T_i^j та відповідний шаблон для явної числової схеми:

- $*$ - значення температур, які задані початковою умовою (3.3);
- \bullet - значення температур, які знаходяться по формулі (3.20);
- \odot - значення температур в граничних точках, які знаходяться за формулами (3.23) та (3.26).

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \approx \frac{T_{i+1}^j - T_i^j}{h}, \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \approx \frac{T_i^j - T_{i-1}^j}{h}, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \approx \frac{T_{i+1}^j - T_{i-1}^j}{2h}, \quad (3.10)$$

що називаються, відповідно, правою, лівою та центральною кінцевою різницею. Такі назви введено з міркувань взаємного розташування точок, для яких розраховується похідна, і точок, що входять у відповідні формули. Аналогічним чином можна записати апроксимаційні формули для частинних похідних у часі:

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial t} \approx \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\tau}, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial t} \approx \frac{T_i^j - T_i^{j-1}}{\tau}, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial t} \approx \frac{T_i^{j+1} - T_i^{j-1}}{2\tau}. \quad (3.13)$$

Комбінуючи вирази (3.8) та (3.9) легко отримати апроксимаційну формулу для частинної похідної другого порядку по координаті r :

$$\frac{\partial^2 T(r,t)}{\partial r^2} \approx \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{h^2}. \quad (3.14)$$

Підставляючи апроксимації похідних в рівняння теплопровідності (3.1) після нескладних перетворень отримуємо:

$$T_i^{j+1} = \left(f + \frac{f}{i}\right)T_{i+1}^j + (1-2f)T_i^j + \left(f - \frac{f}{i}\right)T_{i-1}^j. \quad (3.15)$$

де
$$f = a \frac{\tau}{h^2}. \quad (3.16)$$

Причому для апроксимації частинної похідної по часу використано праву різницю (3.11). Позначимо:

$$a_i = f + \frac{f}{i}, \quad (3.17)$$

$$b_i = 1 - 2f, \quad (3.18)$$

$$c_i = f - \frac{f}{i}, \quad (3.19)$$

тоді вираз (3.15) набуває наступного вигляду:

$$T_i^{j+1} = a_i T_{i+1}^j + b_i T_i^j + c_i T_{i-1}^j. \quad (3.20)$$

$$i = 1, \dots, N-1$$

Значення коефіцієнтів (3.17) - (3.19) легко розраховуються, а рівняння (3.20) дає змогу по трьом точкам j -го шару визначити температурну точку на новому $j+1$ -ому шарі. Це рівняння називається “*різницевою схемою*”. За рахунок очевидної простоти розрахунків його ще називають “*явною різницевою схемою*”. Конфігурацію вузлів сітки, які використовуються для складання різницевої схеми, називають “*шаблоном*”. Явна різницева схема (3.20) характеризується чотирьох точковим шаблоном, який показано на рис. 3.1 б. Сенс цього шаблону полягає в тому, щоб наглядно показати, що три точки попереднього шару явно визначають точку на новому.

Таким чином явна різницева схема (3.20) дозволяє по черзі розрахувати майже всі точки “нового” часового шару. Для початку розрахунків використовується початкова умова задачі (3.3). Тобто за рахунок цієї початкової умови перший початковий шар температур з номером $j = 0$ відомий. Потім, з допомогою (3.20), визначаються значення температур на наступному шарі із номером $j = 1$ в вузлах сітки з номерами $i = 1, \dots, N-1$ по координаті.

Залишається визначити дві граничні точки з номерами $i = 0$ та $i = N$. Для цього використовують граничні умови задачі (3.4) та (3.5). Розглянемо точку $i = 0$. Для неї

виконується умова (3.5) і вона є лівою границею системи, тому часткову похідну в (3.5) апроксимуємо правою різницею (3.8) з відповідним індексом:

$$\lambda \frac{T_1^{j+1} - T_0^{j+1}}{h} = 0. \quad (3.21)$$

Тоді очевидно, що

$$T_0^{j+1} = T_1^{j+1}, \quad (3.22)$$

тобто за відомою температурою в точці $i = 1$ знаходимо температуру в точці $i = 0$. Вираз (3.22) має такий вид в наслідок занадто спрощеної апроксимації і в спеціальній літературі описані методи, які дозволяють суттєво підвищити точність наближення (наприклад балансний метод). Тоді температура T_0^{j+1} визначається через температури попереднього шару T_0^j та T_1^j (без виводу):

$$T_0^{j+1} = (1 - 2f)T_0^j + 2fT_1^j. \quad (3.23)$$

Розглянемо точку $i = N$. Для неї виконується умова (3.4) і вона є правою границею системи, тому часткову похідну в (3.4) апроксимуємо лівою різницею (3.9) з відповідним індексом:

$$\lambda \frac{T_N^{j+1} - T_{N-1}^{j+1}}{h} = -\alpha(T_N^{j+1} - T_p), \quad (3.24)$$

що після нескладних перетворень набуває виду:

$$T_N^{j+1} = \frac{T_{N-1}^{j+1} + \frac{\alpha h}{\lambda} T_p}{1 + \frac{\alpha h}{\lambda}}. \quad (3.25)$$

Цей вираз дозволяє через температуру T_{N-1}^{j+1} визначити температуру граничної точки T_N^{j+1} . Він також є значно спрощеним і, використовуючи балансний метод, можна отримати більш точну апроксимацію, яка включає температурні точки попереднього шару T_{N-1}^j та T_N^j (також без виводу):

$$T_N^{j+1} = 2fT_{N-1}^j + \left[1 - 2f \left(1 + \frac{\alpha h}{\lambda} \right) \right] T_N^j + 2f \frac{\alpha h}{\lambda} T_p. \quad (3.26)$$

Таким чином знайдені всі температурні точки шару з номером $j = 1$ і можна переходити до розрахунків часового шару з номером $j = 2$. Після того як буде розраховано шар з номером $j = 2$, переходимо до розрахунків часового шару з номером $j = 3$ і так далі аж до кінцевого шару $j = M$.

До переваг явної числової схеми відносять, в першу чергу, її простоту. Але ця схема має суттєвий недолік – вона, як кажуть, умовно збігається, тобто наближений, числовий розв’язок наближається до точного лише за умови:

$$f = a \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (3.27)$$

В цій умові крок по часу τ пов'язаний з кроком по координаті h нелінійною, квадратичною залежністю. Відомо, що чим менший крок числових обчислень, тим більш точною буде апроксимація і розв’язок математичної задачі буде більш точним. Але за умови (3.27), якщо h зменшити у 10 разів, то τ потрібно зменшити у 100 разів. Таким чином, при зменшенні кроку по координаті значно збільшується обсяг обчислень, а це, в свою чергу, призводить до різкого збільшення похибки “відсікання”, яка є характерною для обчислень за допомогою комп’ютера. В наслідок цього навіть за виконання умови (3.27) можна отримати абсурдні результати. Тому існує більш складна числова схема, яка називається “*неявною різницевою схемою*” і будується з використанням лівої різниці (3.12). Вона є безумовно стійкою і дозволяє довільно вибирати значення h та τ .

Алгоритм програми, яка реалізує явну різницеву схему розв’язку рівнянь у частинних похідних параболічного типу, приведено на рис. 3.2. Її особливістю є те, що для розрахованих значень температур використовується не двовимірний, а одновимірний масив, вміст якого періодично виводиться на екран (хоча така реалізація не є обов’язковою).

У блок 1 вводяться вхідні дані для розрахунку: температури початкова (T_0), печі (T_p), кінця розрахунку (T_k); теплофізичні характеристики - коефіцієнт тепловіддачі (α), густина матеріалу (ρ); коефіцієнт теплопровідності (λ); питома теплоємність (c); діаметр циліндру (r_0) і кількість точок по координаті (N). У блоці 2 розраховуються крок по координаті (h) і крок по часу (τ). Початкова температура (початкова умова) вводяться в блоці 3. Вона виводиться на екран в блоці 4. У блоці 5 відбувається розрахунок температур на новому часовому шарі для вузлів з номерами $i = 1, \dots, N-1$, а значення температур у вузлах $i = 0$ та $i = N$ визначаються в блоці 6. В блоці 7 температури перезаписуються у буферний (допоміжний) масив, що обумовлено реалізацією конкретного алгоритму. Формування стану лічильників для часу tt і для виводу на екран pp виконується в блоці 8, а сам вивід на екран результатів розрахунків виконується в блоці 9. У блоці 10 перевіряється умова закінчення розрахунків. Якщо обчислене значення температури в центрі циліндра ($i = 0$) $T(0)$ не досягло температури закінчення розрахунку (T_k), то управління передається в блок 5. При не виконанні умови $Tt < T_k$ обчислення припиняються.

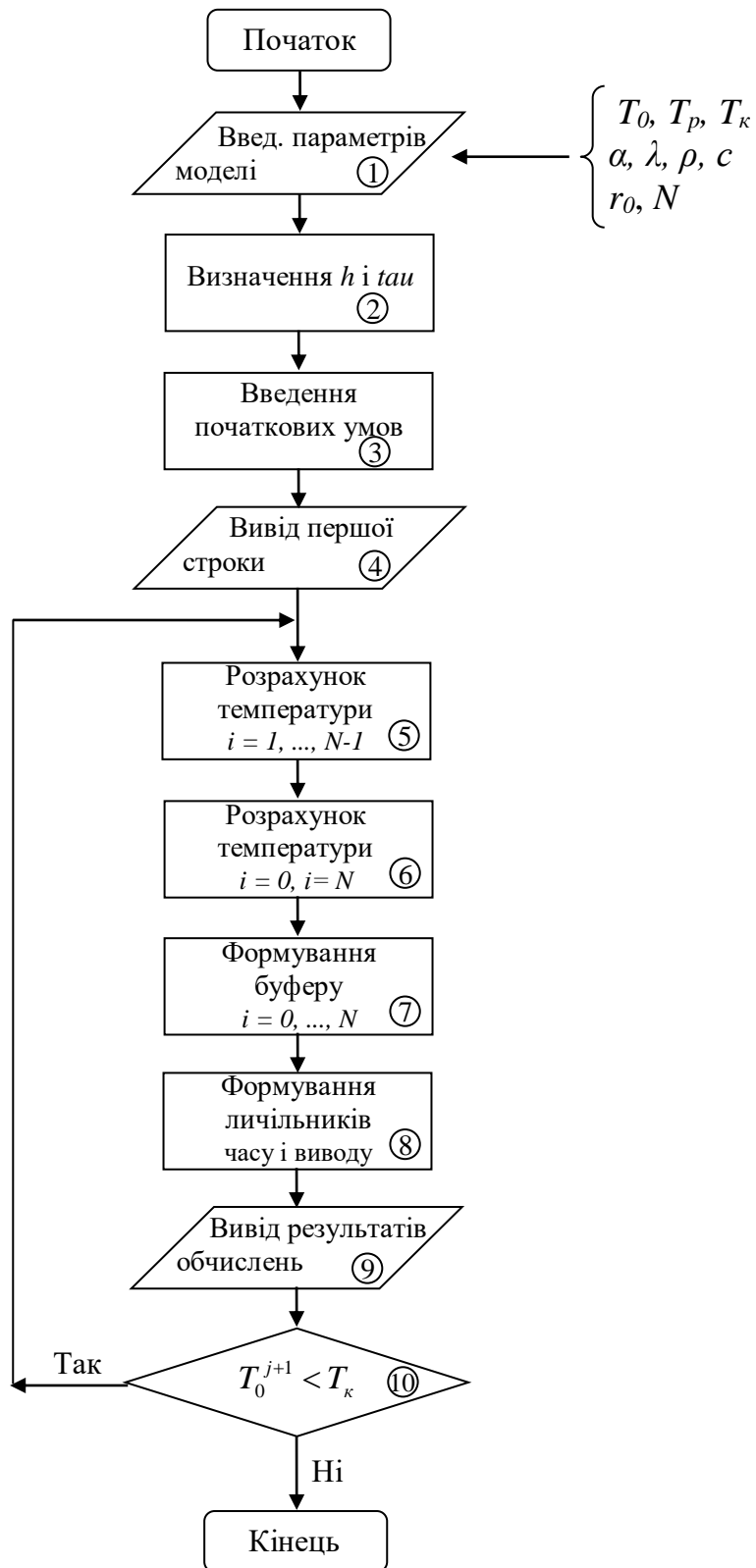


Рис. 3.2 Блок-схема алгоритму розрахунків числової математичної моделі з розподіленими параметрами (явна схема)

Завдання комп'ютерного практикуму

Розрахувати час нагріву заготовки t_n , яка нагрівається в печі та побудувати графік залежності температури від часу в процесі нагрівання в трьох точках, розташованих по перетину системи ($r_l = 0$, $r_l = \frac{r_0}{2}$, $r_l = r_0$). Розрахунки провести використовуючи ітераційні формули чисельної математичної моделі із розгалуженими параметрами (3.20), (3.23), (3.26). Дані для розрахунків задані в таблиці 3.1.

Оператори мови QBasic, які необхідні для програмної реалізації алгоритму на рисунку 3.2:

CLS – очистка екрану;

DATA - завдання числових даних;

READ - зчитування числових даних;

INPUT – введення числових даних з клавіатури;

PRINT - вивід інформації на екран;

GOTO (10) – безумовний перехід на позначену мітку;

IF Умова THEN Оператор 1 ELSE Оператор 2 – оператор умови. Якщо “Умова” виконується, то виконується “Оператор 1”, якщо ні, то виконується “Оператор 2”

IF Умова THEN

Оператор 1a

Оператор 2a

.....

Оператор ka

ELSE

Оператор 1b

Оператор 2b

.....

Оператор wb

END IF

Варіант складного оператора умови. Якщо “Умова” виконується, то виконуються “Оператор 1a”, “Оператор 2a” ... “Оператор k”, якщо ні, то виконуються: “Оператор 1b”, “Оператор 2b” ... “Оператор wb”

DIM G(N) – опис масиву розмірності N;

FOR ...NEXT - цикл розрахунків із лічильником;

SLEEP – зупинка виконання програми до натискання довільної клавіши.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Проаналізувати алгоритм числового розв'язання задачі (3.1) – (3.5) про нагрівання заготовки для термічної обробки та скласти комп'ютерну програму, що його реалізує, на мові QBasic (або іншій за бажанням студента).
2. Перевірити правильність комп'ютерної програми на контрольному прикладі.
3. Провести розрахунки використовуючи розроблену комп'ютерну програму. Рекомендований крок розрахунків $h = 1$ секунда.
4. Побудувати графіки процесу нагрівання в трьох точках, розташованих по перетину системи ($r_l = 0$, $r_l = \frac{r_0}{2}$, $r_l = r_0$), використовуючи отримані результати розрахунків.
5. Проаналізувати отримані результати та сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити комп'ютерний практикум.

Контрольні запитання

1. Якими умовами необхідно доповнити рівняння теплопровідності, яке є основою математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування?
2. На якій підставі відбувається вибір початкових та граничних умов, що необхідні для доповнення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування?
3. Що є основою методу кінцевих різниць, який використовується для числового рішення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування?
4. Як впливає вибір типу кінцевих різниць на числове рішення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування?
5. Що можна віднести до переваг явної числової схеми рішення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування?
6. Чи є безумовно стійкою явна числова схема рішення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування? Що можна віднести до переваг неявної числової схеми рішення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування?

7. Чи є безумовно стійкою неявна числова схема рішення рівняння теплопровідності, при побудові математичної моделі з розподіленими параметрами для опису нагріву вала під гартування.

Література

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука. – 1977. – 735 с.
2. Артюнов В.А., Бухмиров В.В., Крупенников С.А. Математическое моделирование тепловых промышленных печей. – М.: Metallurgia. – 1990. – 239 с
3. Мудров А.Е. Численные методы для ЭВМ на языках Бэйсик, Фортран и Паскаль. – Томск: МП «РАСКО», 1991. – 272 с.
4. В.Е.Зиновьев. Теплофизические свойства материалов при высоких температурах. Справочник. М., Metallurgia. – 1989.- 383 с.
5. Коссак О., Тумашова О., Коссак О. Методи наближених обчислень. – Львів. – Бак.- 2003. – 165 с.

Таблиця 3.1

Параметри для розрахунку часу нагріву металевої заготовки
(комп'ютерний практикум №3)

№ варіанту	Метал	Геометричні параметри зразка		$T_p, [C]$	$T_0, [C]$	$\alpha, [Вт \cdot м^{-2} \cdot К^{-1}]$	$\Delta T, \%$
		$r, см$	$l, см$				
1	Cu	5	10	600	20	200	1
2	Cu	6	11	550	18	50	1,5
3	Cu	2	15	700	20	130	5
4	Cu	10	10	500	25	60	3
5	Cu	3	100	700	18	90	2
6	Cu	10	5	670	25	100	1,5
7	Cu	13	22	720	20	70	2
8	Cu	14	22	620	18	90	3
9	Cu	6	14	620	20	30	5,5
10	Al	7	16	500	25	100	2
11	Al	10	21	650	18	65	3,5
12	Al	4	11	540	18	75	4
13	Al	9	30	700	20	80	5
14	Al	3	10	500	20	90	3
15	Al	3	5	640	18	120	1
16	Al	5	12	550	25	90	2,5
17	Al	5	17	650	20	80	3
18	Al	9	17	620	18	95	4
19	Cu	8	15	600	25	110	1
20	Cu	11	22	620	18	150	5
21	Cu	1	11	580	20	50	3,5
22	Al	4	20	680	25	60	2,5
23	Al	3	13	710	18	80	3,5
24	Al	12	24	625	20	70	1,5
25	Al	1	50	725	20	100	3

ІДЕНТИФІКАЦІЙНІ МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ. МЕТОД НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Мета роботи: освоєння комп'ютерної реалізації багатовимірного методу найменших квадратів для побудови ідентифікаційних регресійних математичних моделей.

Теоретичні відомості

Для вирішення задачі апроксимації результатів експерименту або побудови математичних моделей при обробці експериментальних даних (ідентифікаційного типу або регресійних) часто використовують метод, який отримав назву “*метод найменших квадратів*” (МНК). Основна ідея цього методу це є мінімізація суми квадратів відхилень апроксимуючої залежності від експериментальних точок (принцип Лежандра). Метод найменших квадратів дозволяє реалізувати апроксимацію даних експерименту одновимірною і багатовимірною, як лінійною, так і нелінійною функцією.

Нехай в процесі експерименту отримані дані, що записані у вигляді таблиці, яка складається із N точок:

$$(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.1)$$

Апроксимуємо табличні дані залежністю, яка є лінійною комбінацією деяких базисних функцій і має вигляд:

$$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + \dots + c_m\varphi_m(x), \quad (4.2)$$

де c_0, c_1, \dots, c_m - коефіцієнти; $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ – деякі базисні функції.

Вигляд базисних функцій на даному етапі не визначаємо. Для того, щоб вираз (4.2) дійсно описував таблицю (4.1) потрібно визначити коефіцієнти c_0, c_1, \dots, c_m . Для цього запишемо принцип Лежандра:

$$Q = \sum_{i=1}^N [\varphi(x_i) - y_i]^2 \rightarrow \min, \quad (4.3)$$

де Q – сума квадратів відхилень апроксимуючої функції $\varphi(x_i)$ від точок таблиці y_i .

Підставляючи вираз (4.2) в суму квадратів відхилень (4.3) отримуємо:

$$Q = \sum_{i=1}^N [c_0\varphi_0(x_i) + c_1\varphi_1(x_i) + c_2\varphi_2(x_i) + \dots + c_m\varphi_m(x_i) - y_i]^2 \rightarrow \min. \quad (4.4)$$

Базисні функції $\varphi_j(x_i)$ (де $j = 0, 1, 2, \dots, N$) в виразі (4.4) є сталими величинами тому, що їх аргументи це точки таблиці (4.1). Тобто функція фіксованого аргументу є

сталого величиною. Таким чином функція Q є функцією від $m+1$ аргументів і по принципу Лежандра потрібно знайти її мінімум:

$$Q = Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m) \rightarrow \min. \quad (4.5)$$

Задача (4.5) є класичною задачею, яка досліджується в теорії оптимізації. Ознакою точки, в якій існує максимум або мінімум (стаціонарна точка) для функції багатьох змінних, є рівність нулю її градієнта. “Градієнт” – це вектор, який направлений у бік максимального зростання функції, компонентами якого є частинні похідні:

$$\nabla y(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{\partial y}{\partial x_1} \vec{i}_1 + \frac{\partial y}{\partial x_2} \vec{i}_2 + \dots + \frac{\partial y}{\partial x_k} \vec{i}_k, \quad (4.6)$$

тут $\frac{\partial y}{\partial x_j}$ - частинні похідні; \vec{i}_j - одиничні вектори.

Тобто екстремум функції буде у точці, для якої виконується умова:

$$\nabla Q(c_0, c_1, c_2, \dots, c_m) = 0. \quad (4.7)$$

Нагадаємо, вектор дорівнює нулю, коли всі його компоненти дорівнюють нулю. Тому рівняння (4.7), яке записано в операторному вигляді, розпадається на систему рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Q}{\partial c_0} = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_1} = 0, \\ \dots\dots\dots \\ \frac{\partial Q}{\partial c_m} = 0. \end{array} \right. \quad (4.8)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Q}{\partial c_0} = 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_0(x_i) = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_1} = 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_1(x_i) = 0, \\ \frac{\partial Q}{\partial c_2} = 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_2(x_i) = 0, \\ \dots\dots\dots \\ \frac{\partial Q}{\partial c_m} = 2 \sum_{i=1}^N [c_0 \varphi_0(x_i) + c_1 \varphi_1(x_i) + c_2 \varphi_2(x_i) + \dots + c_m \varphi_m(x_i) - y_i] \varphi_m(x_i) = 0. \end{array} \right. \quad (4.9)$$

- вона позитивно визначена, тобто при розв'язку системи нормальних рівнянь методом Гауса 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 є не повністю формалізованим процесом. Звичайно на вид цих функцій впливає, в першу чергу, властивості системи, що досліджується, таких як періодичність, експоненціальний або логарифмічний характер, властивості симетрії, наявність асимптотики та інша апіорна інформація. Наприклад, якщо досліджується процес, який самостійно розвивається (дифузія, теплопередача), то в якості базисних можна вибрати експоненціальні функції. В разі дослідження коливальних систем бажано користатися періодичними функціями (синуси, косинуси). А взагалі на процес вибору апроксимуючих базисних функцій суттєво впливає власний досвід дослідника та його інтуїція. Ще потрібно зауважити, що задача апроксимації не має єдиного розв'язку. Не можна говорити наперед, що апроксимація, наприклад, степеневою функцією буде кращою ніж експонентою. Часто можна використовувати обидві, а наближення буде краще там, де залишки (тобто різниці між експериментальними значеннями і апроксимованими, які ще мають назву "нев'язка") у сумарному вигляді по абсолютному значенню їх квадратів будуть меншими. Ще існує емпіричний закон, що при обробці експериментальних даних, які визначені із похибкою δ_i в кожній вузловій точці таблиці 1, апроксимація вважається задовільною, якщо квадратний корінь суми квадратів відхилень \sqrt{Q} приблизно дорівнює δ_{max} (максимальному значенню із δ_i), тобто:

$$\sqrt{Q} \approx \delta_{max}. \quad (4.13)$$

Іноді апроксимацію складною функцією типу (4.2) реалізують покроковою процедурою. Спочатку функцію (4.2) складають з однієї або двох базисних функцій. Розраховують коефіцієнти c_j , визначають величину Q і якщо виконується умова:

$$\sqrt{Q} > \delta, \quad (4.14)$$

то розширюють базис функції (4.2) доповнюючи її ще однією $\varphi_j(x)$ і повторяють розрахунки. Розширення базису проводять до тих пір, поки не виконається умова (4.13). При цьому потрібно пам'ятати, що кількість базисних функцій m пов'язана із кількістю точок N таблиці (4.1) співвідношенням:

$$N \geq m+1, \quad (4.15)$$

щоб система (4.11) мала єдиний розв'язок. Розв'язати систему (4.11) можна будь яким способом, наприклад методом Гаусса.

Стан складних систем стан, зазвичай, залежить від декількох змінних. Наприклад, механічні властивості чавунів залежать від складу сплаву (кількості Fe, C, Si, Mn, P, S та інших) та, наприклад, від термо-часової обробки розплаву. Такий варіант експерименту можна представити схемою, яка представлена на Рис. 4.1.

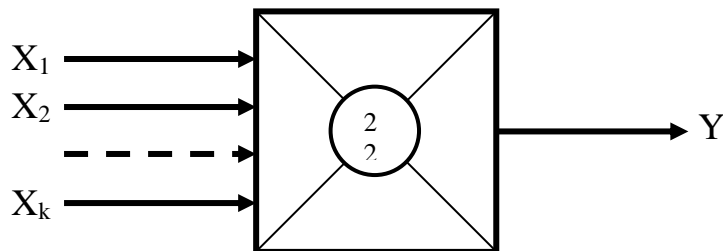


Рис. 4.1 Схематичне зображення багатофакторного експерименту, коли система, яку досліджують, є функцією багатьох змінних $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$
 X_1, X_2, \dots, X_k – k -факторів, що впливають на систему);
 Y – відгук системи;
 S – система, яку досліджують.

Тут на систему S мають вплив k -факторів X_j , що змінюють її стан, який відображається відгуком Y . Такий експеримент називають “багатофакторним”. Він є характерним для багатьох промислових, технологічних експериментів.

Для апроксимації результатів багатофакторних експериментів також можна застосувати принцип Лежандра, тобто реалізувати метод найменших квадратів. В цьому випадку потрібно застосувати загальний алгоритм МНК і в якості базових функцій вибрати k -факторів (в разі необхідності їх ступені і добутки). Базисні функції лінійного варіанту багатофакторної апроксимації мають вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_0(x) = x_0, \\ \varphi_1(x) = x_1, \\ \varphi_2(x) = x_2, \\ \dots\dots\dots \\ \varphi_m(x) = x_k, \end{array} \right. \quad (4.16)$$

В цьому випадку загальна апроксимуюча функція набуває вигляду:

$$\varphi(x) = c_0 x_0 + c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + \dots + c_k x_k. \quad (4.17)$$

Вигляд розширеної матриці Грама для системи лінійного варіанту багатofакторної апроксимації можна отримати повторивши викладки, які показані вище. Вона має наступний вигляд:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N x_{0i}^2 & \sum_{i=1}^N x_{1i}x_{0i} & \sum_{i=1}^N x_{2i}x_{0i} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki}x_{0i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{0i} \\ \sum_{i=1}^N x_{0i}x_{1i} & \sum_{i=1}^N x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^N x_{2i}x_{1i} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki}x_{1i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^N x_{0i}x_{2i} & \sum_{i=1}^N x_{1i}x_{2i} & \sum_{i=1}^N x_{2i}^2 & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki}x_{2i} & \sum_{i=1}^N y_i x_{2i} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=1}^N x_{0i}x_{ki} & \sum_{i=1}^N x_{1i}x_{ki} & \sum_{i=1}^N x_{2i}x_{ki} & \dots & \sum_{i=1}^N x_{ki}^2 & \sum_{i=1}^N y_i x_{ki} \end{pmatrix} \cdot \quad (4.18)$$

Розв'язок системи, яка описується розширеною матрицею (4.18), також знаходять за допомогою відповідних методів.

Комп'ютерна програма "MNK1" (яка надається викладачем) реалізує багатовимірний метод найменших квадратів.

Побудова будь-якої моделі закінчується перевіркою її адекватності. Для доведення адекватності ідентифікаційних математичних моделей можна використати статистичний критерій Фішера. Але значно частіше якість моделі (її адекватність) після використання МНК оцінюють по таблиці залишків. Таблиця залишків являє собою різницю між результатами експериментами ($Y_{\text{експ.}}$) та значеннями відгуку, які розраховані по моделі ($Y_{\text{расч.}}$), по відношенню до $Y_{\text{експ.}}$, що виражена у відсотках $\left(\frac{Y_{\text{експ.}} - Y_{\text{расч.}}}{Y_{\text{експ.}}}\right) \cdot 100\%$. Цю

таблицю залишків можна розглядати як похибку апроксимації. Якщо похибка апроксимації приблизно дорівнює або менша за похибки експерименту, то побудовану математичну модель можна вважати адекватною.

Завдання комп'ютерного практикуму

Побудувати математичну модель, використовуючи дані багатofакторного експерименту і методику покрокового регресійного аналізу, яка базується на багатовимірному варіанті методу найменших квадратів. Визначити адекватність моделі.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Запустити програму "MNK1" на виконання.

2. Ввести дані в таблицю, для чого потрібно натиснути на кнопку “Таблица” (Рис. 4.2). Дані вводити у відповідні стовпчики послідовно по порядку. Роздільний знак цілої та дробової частин числа – кома. Після закінчення вводу даних їх потрібно зберегти у вигляді файлу. Для цього потрібно натиснути “Файл” та “Сохранить” та набрати назву файлу “***.mpk”. Якщо потрібно працювати із файлом, який вже існує, то натискаємо “Файл” та “Открыть” і далі вказується назва потрібного файлу.

3. Перевести програму у режим обчислень коефіцієнтів кореляції, натиснувши клавішу “Расчет R(x,y)” (Рис. 4.3). Розрахувати значення коефіцієнтів кореляції факторів експерименту ($R_{xi,y}$) та ефектів взаємодії ($R_{xi-xj,y}$) з відгуком Y та записати їх у порядку спадання.

4. Провести побудову математичної моделі. Для цього перевести програму у режим обчислень натиснувши клавішу “Расчет”. У вікно “Порог [0..1]” ввести приблизно середнє значення коефіцієнтів кореляції. Взагалі можна у цьому вікні залишити нуль. Введена величина впливає на запропонований програмою вигляд математичної моделі. Потім натиснути клавішу “Рассчитать”. У відповідному вікні з’явиться формула математичної моделі, яку в разі необхідності можна коригувати (підказка для коригування розташована над вікном). Якщо потрібно змінити вигляд математичної моделі, то очистити вікно із формулою можна натисканням клавіши “Очистить”. Після натискання кнопки “Насчитать коэффициенты” відбувається розрахунок коефіцієнтів моделі, значення яких з’являється у вікні знизу. Вікно праворуч дає інформацію стосовно адекватності моделі. В першій колонці зазначеного вікна показано номер експериментальної точки з таблиці даних. В другій – введені в таблицю значення відгуку ($Y_{\text{експ.}}$), а в третій – апроксимовані з допомогою побудованої математичної моделі значення відгуку ($Y_{\text{расч.}}$). В останній колонці наведена таблиця залишків, тобто похибка апроксимації, визначена як різниця між ($Y_{\text{експ.}}$)

та ($Y_{\text{расч.}}$) по відношенню до ($Y_{\text{експ.}}$), що виражена у відсотках $\left(\frac{Y_{\text{експ.}} - Y_{\text{расч.}}}{Y_{\text{експ.}}} \right) \cdot 100\%$. Якщо

похибка апроксимації приблизно дорівнює або менша за похибку експерименту, то побудована математична модель вважається адекватною і розрахунки закінчуються. В разі неадекватності моделі потрібно повернутись на етап формування формули і повторити розрахунки. При цьому зручно використовувати алгоритм покрокової регресії. Він полягає у своєрідному варіанті методу послідовних наближень. Спочатку будується достатньо проста математична модель, в якій використовуються фактори та ефекти взаємодії (додатки факторів) з найбільшими коефіцієнтами кореляції, а потім поступово (крок за кроком) додаються інші. Вдалих чи не вдалих крок оцінюється по величині значення “Сумма”. Якщо при введенні нового члену в формулу моделі “Сумма” суттєво

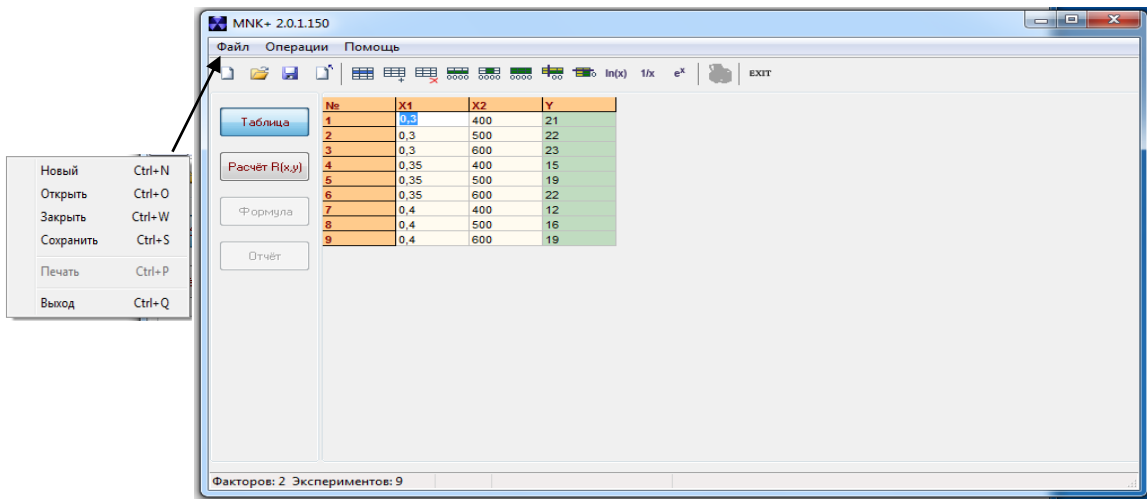


Рис. 4.2 Интерфейс программы “MNK1”, що відповідає початку роботи

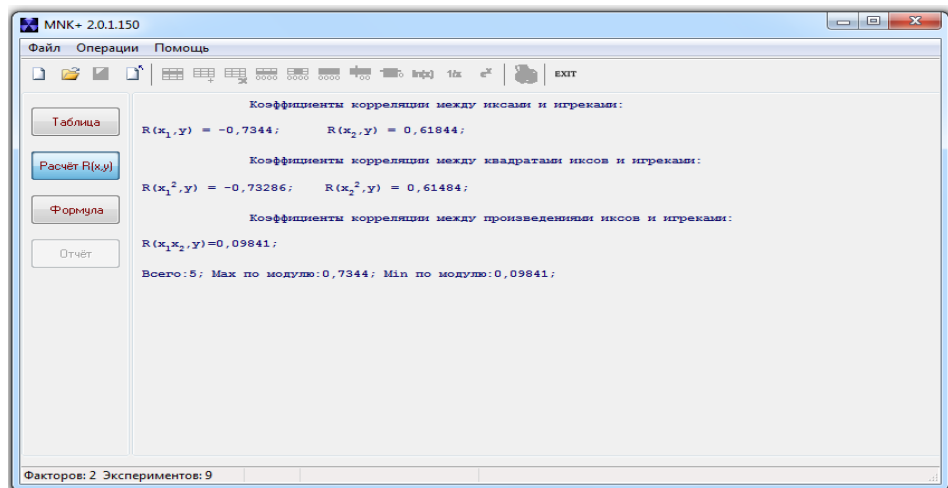


Рис. 4.3 Интерфейс программы “MNK1”, що відповідає розрахунку коефіцієнтів кореляції

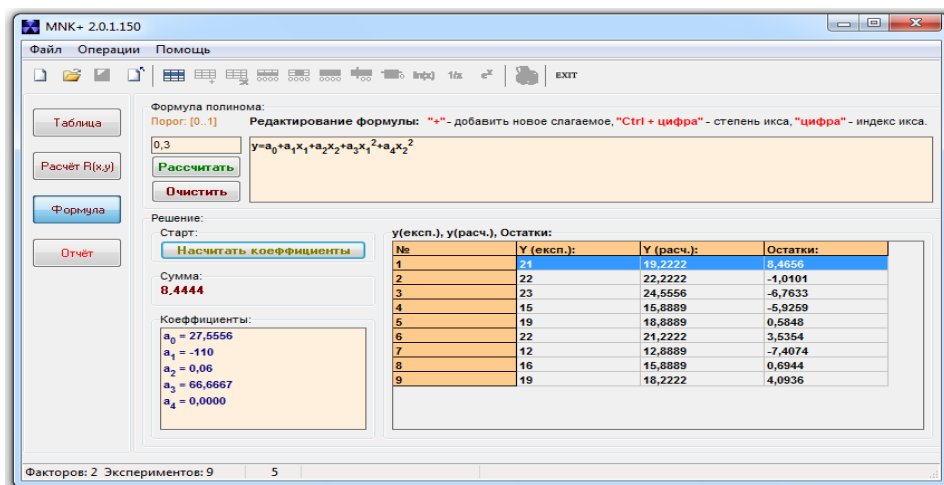



Рис. 4.4 Интерфейс программы “MNK1”, що відповідає розрахунку коефіцієнтів моделі

зменшується, то крок вважається вдалим. Якщо ні, то даний фактор або ефект взаємодії краще не враховувати.

Треба також зазначити, що при наявності окремих точок, в яких існують окремі відносно великі відхилення, їх можна виключити з регресії. Для цього потрібно повернутись на етап формування таблиці даних і вибрати відповідну команду у верхньому меню. Там же є кнопки, що дозволяють робити лінеаризацію вихідних даних: “ln(x)”, “1/x”, “e^x”.

5. Вивести результати розрахунків на друк. Для цього потрібно використати кнопку “Отчет” (рис. 4.5). А потім із наступного меню натиснути на клавішу  і отримати результати обчислень на папері. В разі коли принтер не підключений до комп'ютера, на якому виконуються обчислення, цією операцією користуватись не потрібно.

6. Закінчити обчислення і вийти з програми вибравши команду “Enter” на інтерфейсі виводу результатів (рис. 4.2) або “Выход” в загальному меню (Рис. 4.2).

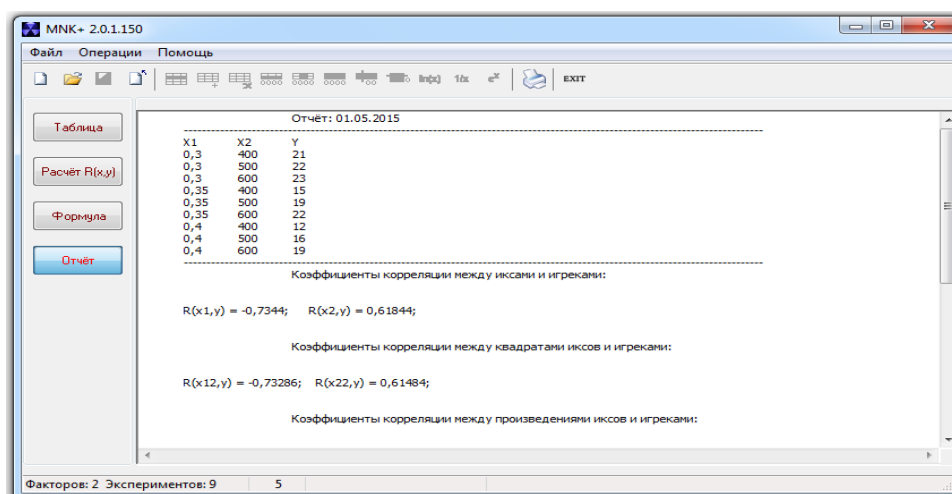


Рис. 4.5 Інтерфейс програми “MNK1”, що відповідає виводу результатів розрахунків на друк

7. Проаналізувати отримані результати та сформулювати висновки по роботі.
8. Оформити протокол виконання комп'ютерного практикуму.

Контрольні запитання

1. Сформулюйте принцип Лежандра (принцип МНК).
2. Що є ознакою екстремуму функції багатьох змінних ?
3. Сформулюйте визначення градієнта.
4. Які властивості має інформаційна матриця (матриця Грама) ?
5. Яким співвідношенням і чому пов'язані між собою кількість базисних функцій m та кількість експериментальних точок N ?

6. Який експеримент називається багатofакторним ?

7. Який принцип закладено у покроковій регресії ?

Література

1. Мудров А.Е. Численные методы для ЭВМ на языках Бэйсик, Фортран и Паскаль.
– Томск: МП «РАСКО», 1991. – 272 с.

2. Коссак О., Тумашова О., Коссак О. Методи наближених обчислень. – Львів. –
Бак.- 2003. – 165 с.

СИМПЛЕКС- ЗАГРАТОВАНИЙ ПЛАНОВАНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ ПОБУДОВИ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ “СКЛАД - ВЛАСТИВОСТІ” СПЛАВУ СИСТЕМИ Al-Mg-Zn

Мета роботи: опанування методу планування експерименту типу “склад - властивості” та побудови математичних моделей високих порядків на прикладі дослідження сплаву системи Al-Mg-Zn.

Теоретичні відомості

Застосування симплекс-загратованих планів (планів Г. Шеффе) обумовлено тим, що вирішення задачі вибору оптимального хімічного складу багатокомпонентного сплаву або будь-якої суміші включає вимогу стовідсоткової суми компонентів x_i :

$$\sum_{i=1}^k x_i = 1 \quad (100\%), \quad (5.1)$$

що робить неможливим використання факторних методів планування експерименту. І дійсно, перший рядок матриць плану активних факторних експериментів має рядок, в якому всі фактори знаходяться на нижньому рівні, тобто дорівнюють -1 . А в останньому їх рядку всі фактори знаходяться на верхньому рівні, тобто дорівнюють $+1$. Тобто в першому випадку сума всіх компонент буде менше 100% , а в другому – більше. Проте склад всіх компонентів сплаву не може бути ні менший та не більший за 100% . Всі ці міркування стосуються як сплавів, так і сумішей. Але надалі для зручності будемо говорити про сплави.

Так як сума часток всіх компонентів, що складають сплав, дорівнює одиниці, то факторний простір може бути представлено правильним симплексом. *Симплексом називається $N + 1$ рівновіддалена вершина в N -вимірному просторі.* Для трьох компонентів симплекс є рівностороннім або правильним трикутником.

Властивості складу при симплекс-загратованому плануванні експерименту досліджуються в наперед заданих точках симплекса, що утворюють так звану симплексну решітку. Кожній решітці відповідає цілком певна поліноміальна математична модель (поліном), коефіцієнти якої визначаються по спеціальним формулам або із застосуванням методу найменших квадратів (МНК). На практиці при математичному моделюванні систем типу “склад - властивості” застосовують поліноми до четвертого ступеня включно.

При симплексно-загратованому плануванні використовують ідею покрокового пошуку. Підвищення степені полінома після кожного кроку здійснюється після перевірки

адекватності моделі. Чим вище ступінь поліному, тим більше дослідів необхідно провести для його побудови. Необхідну кількість дослідів (N) в експерименті можна розрахувати по формулі:

$$N = \frac{(m + q - 1)}{m!(q - 1)!}, \quad (5.2)$$

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

Для визначення необхідної кількості дослідів також можна користуватись таблицею 5.1.

Таблиця 5.1

Мінімальна кількість дослідів для побудови математичних моделей різних ступенів

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

Розташування дослідів у факторному просторі можна легко простежити на прикладі трьох компонентного сплаву. Відомо, що склад трьох компонентного сплаву може бути представлений на трикутній діаграмі. При цьому кожній точці діаграми відповідає один, цілком визначений склад, а кожному складу відповідає одна точка на діаграмі. В кожній вершині трикутної діаграми склад одного з компонентів складає 100%. На протилежній до цієї вершини стороні склад цього компоненту дорівнює нулю.

Для побудови лінійної моделі необхідно виконати три дослідів (рис. 5.1 а). Четвертий дослід в центрі трикутника виконується для перевірки адекватності побудованої моделі. Цифри біля точок відповідають підрядковим індексам відгуків. Кількість цифр в індексі означає частки компонентів в сплаві. Число повторів кожної цифри дорівнює кількості часток відповідного компоненту. При такій індексації план експерименту для лінійної моделі при трьох компонентах сплаву може бути заданим таблицею 5.2.

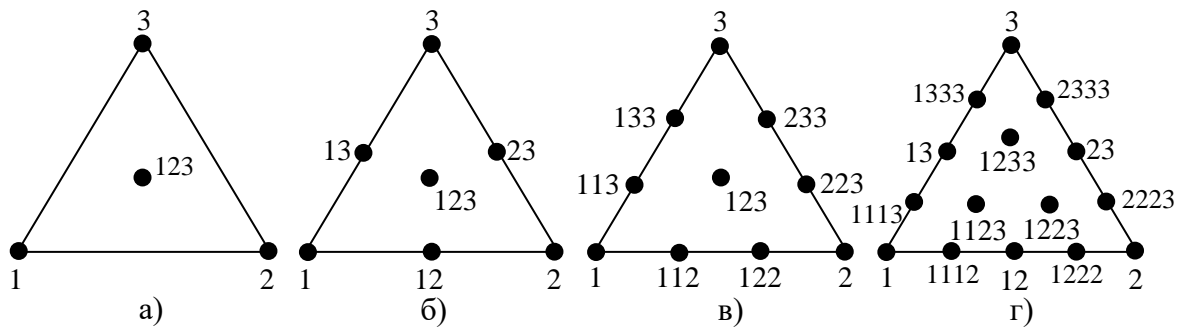


Рис. 5.1. Розташування дослідів в факторному просторі для різних математичних моделей при трьох компонентах сплаву:

а) – лінійна модель; б) – квадратна та спеціальна кубічна модель; в) – кубічна модель; г) – модель четвертого ступеня.

Таблиця 5.2

План експерименту для побудови лінійної моделі трьох компонентного сплаву

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

Для побудови математичної моделі другого ступеня потрібно виконати шість дослідів (рис. 5.1 б). План такого експерименту наведено в таблиці 5.3. Дослід в центрі плану зі сплавом, який містить по 1/3 частки кожного компоненту, використовується для перевірки адекватності моделі. Таблиця 5.3 відрізняється від таблиці 5.2 тим, що в ній добавлені дослід з бінарними сплавами, частки компонентів яких дорівнюють по 1/2, тобто по 50%. Таким чином, для переходу від лінійної моделі до квадратичної необхідно доповнити план трьома дослідом з бінарними сплавами з рівним вмістом в них кожного компоненту.

Для побудови математичної моделі четвертого ступеня до семи дослідом потрібно додати ще шість бінарних сплавів, які складаються з 1/4 одного компонента та 3/4 другого, та три дослідом зі сплавами, які складаються з 1/2 одного компонента та 1/4 двох інших (рис. 5.1 г).

На рисунку 5.1 в показано розподіл точок симплексної решітки для побудови моделі третього ступеня. Всього в плані десять дослідів: три з чистими компонентами, один в центрі зі складом по 1/3 кожного компоненту та шість дослідів з бінарними сплавами, які повинні містити 1/3 одного компонента та 2/3 другого.

Таблиця 5.3

План експерименту для побудови лінійної моделі трьох компонентного сплаву

Дослід	Склад компонентів			Відгук
	x_1	x_2	x_3	
1	1	0	0	Y_1
2	0	1	0	Y_2
3	0	0	1	Y_3
4	1/2	1/2	0	Y_{12}
5	1/2	0	1/2	Y_{13}
6	0	1/2	1/2	Y_{23}
7	1/3	1/3	1/3	Y_{123}

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

Лінійна модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i, \quad (5.3)$$

де $b_i = Y_i$.

Квадратична модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} x_i x_j, \quad (5.4)$$

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

Спеціальна кубічна модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijk} x_i x_j x_k, \quad (5.5)$$

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

Кубічна модель:

$$Y = \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijk} x_i x_j x_k, \quad (5.6)$$

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

$b_{ijk} = 27Y_{ijk} - \frac{27}{4}(Y_{ij} + Y_{ij} + Y_{ik} + Y_{ik} + Y_{jk} + Y_{jk}) + \frac{9}{2}(Y_i + Y_j + Y_k)$.

Модель четвертого ступеня:

$$\begin{aligned}
Y = & \sum_{1 \leq i \leq q} b_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \gamma_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{1 \leq i > j \leq q} \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j)^2 + \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{iijk} x_i^2 x_j x_k + \sum_{1 \leq i < j \leq q} b_{ijjk} x_i x_j^2 x_k + \sum_{1 \leq i < j < k \leq q} b_{ijkk} x_i x_j x_k^2 + \sum_{1 \leq i < j < k < l \leq q} b_{ijkl} x_i x_j x_k x_l, \quad (5.7)
\end{aligned}$$

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

$$\gamma_{ij} = \frac{8}{3}(-Y_i + 2Y_{iij} - 2Y_{ijj} + Y_j); \quad \delta_{ij} = \frac{8}{3}(-Y_i + 4Y_{iij} - 6Y_{ij} + 4Y_{ijj} + Y_j);$$

$$\begin{aligned}
b_{iijk} = & 32(3Y_{iijk} - Y_{iijk} - Y_{iikk}) + \frac{8}{3}(6Y_i - Y_j - Y_k) - 16(Y_{ij} + Y_{ik}) - \\
& - \frac{16}{3}(5Y_{iij} + 5Y_{iik} - 3Y_{ijj} - 3Y_{ikk} - Y_{jjk} - Y_{jkk});
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{ijjk} = & 32(3Y_{ijjk} - Y_{ijjk} - Y_{ijkk}) + \frac{8}{3}(6Y_j - Y_i - Y_k) - 16(Y_{ij} + Y_{jk}) - \\
& - \frac{16}{3}(5Y_{ijj} + 5Y_{jjk} - 3Y_{iij} - 3Y_{jkk} - Y_{iik} - Y_{ikk});
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{ijkk} = & 32(3Y_{ijkk} - Y_{ijkk} - Y_{iikk}) + \frac{8}{3}(6Y_k - Y_i - Y_j) - 16(Y_{ik} + Y_{jk}) - \\
& - \frac{16}{3}(5Y_{ikk} + 5Y_{jkk} - 3Y_{iik} - 3Y_{jjk} - Y_{iij} - Y_{ijj});
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{ijkl} = & 256Y_{ijkl} - 32(Y_{iijk} + Y_{ijjl} + Y_{iikl} + Y_{ijjk} + Y_{ijjl} + Y_{jjkl} + Y_{ijkk} + Y_{ikk} + Y_{ijll} + Y_{jkl} + Y_{jkk}) + \\
& + \frac{32}{3}(Y_{iijl} + Y_{iik} + Y_{iil} + Y_{ijj} + Y_{jjk} + Y_{jjl} + Y_{ikkk} + Y_{jkk} + Y_{kkk} + Y_{iill} + Y_{jll} + Y_{kll}).
\end{aligned}$$

Користуючись симплекс - решітчастим плануванням, одержуємо моделі, число коефіцієнтів регресії в яких точно відповідає числу дослідів в плані. При цьому не залишається жодної ступені свободи для перевірки адекватності моделі. Цю обставину потрібно віднести до недоліків планів Г. Шеффе. Вихід із такого положення дуже простий: адекватність моделі перевіряють по контрольним дослідам в частині факторного простору, яка цікавить дослідника. На практиці, як правило, перевірку виконують в центральній точці факторного простору.

Одержані поліноміальні моделі в разі їх адекватності експериментальним даним аналізуються в залежності від поставленого завдання. Можна, наприклад, провести дослідження моделі на екстремум і знайти максимальне чи мінімальне значення відгуку. В разі експерименту із системою, в якій три фактори, зручно і наглядно представляти результати моделювання у вигляді контурних кривих на трикутних діаграмах.

На практиці залежність властивостей від складу сплаву зазвичай описують відрізком степеневого ряду (поліномом тієї чи іншої степені). Задача дослідника зводиться до уточнення ступеня поліному, вибору необхідної кількості експериментальних точок, проведення експерименту та вимірюванню властивостей в цих точках і розрахунку

коефіцієнтів обраної моделі по одержаним експериментальним значенням. Так як поверхня відгуку в багатокомпонентних системах має, як правило, досить складний характер, її потрібно описувати поліномами порівняно високої степені (третьої і вище).

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

Загальний вид моделі четвертого ступеня для трьохкомпонентної системи ($q = 3$), який формується із виразу (5.7), має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}
 Y = & b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + \gamma x(x-x) + \gamma x(x-x) + \gamma x(x-x) + \\
 & + \gamma_{12}x_1x_2(x_1-x_2) + \gamma_{13}x_1x_3(x_1-x_3) + \gamma_{23}x_2x_3(x_2-x_3) + \\
 & + \delta_{12}x_1x_2(x_1-x_2)^2 + \delta_{13}x_1x_3(x_1-x_3)^2 + \delta_{23}x_2x_3(x_2-x_3)^2 + \\
 & + b_{1123}x_1^2x_2x_3 + b_{1223}x_1x_2^2x_3 + b_{1233}x_1x_2x_3^2, \quad (5.8)
 \end{aligned}$$

де Y - механічні властивості сплаву Al-Mg-Zn; x_1, x_2, x_3 - відповідно частки Mg, Zn, та Al; b, γ, δ - коефіцієнти математичної моделі, які розраховуються за формулами:

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

$$i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3;$$

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

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

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

$$\delta_{12} = \frac{8}{3}(-Y_1 + 4Y_{1112} - 6Y_{12} + 2Y_{1222} + Y_2);$$

$$\delta_{13} = \frac{8}{3}(-Y_1 + 4Y_{1113} - 6Y_{13} + 2Y_{1333} + Y_3);$$

$$\delta_{23} = \frac{8}{3}(-Y_2 + 4Y_{2223} - 6Y_{23} + 2Y_{2333} + Y_3);$$

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

$$\begin{aligned}
 b_{1223} = & 32(3Y_{1223} - Y_{1123} - Y_{1233}) + \frac{8}{3}(6Y_2 - Y_1 - Y_3) - 16(Y_{12} - Y_{23}) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{16}{3}(5Y_{1222} + 5Y_{2223} - 3Y_{2333} - 3Y_{2223} - Y_{1113} - Y_{1333}); \\
b_{1233} = & 32(3Y_{1233} - Y_{1123} - Y_{1233}) + \frac{8}{3}(6Y_{13} - Y_1 - Y_2) - 16(Y_{13} - Y_{23}) - \\
& -\frac{16}{3}(5Y_{1333} + 5Y_{2223} - 3Y_{1113} - 3Y_{2223} - Y_{1112} - Y_{1222}).
\end{aligned}$$

Кількість необхідних дослідів для побудови математичної моделі четвертого ступеня дорівнює п'ятнадцяти ($N = 15$), що можна розрахувати з допомогою виразу (5.2) при $q = 3$ та $m = 4$. Для перевірки адекватності моделі бажано провести шістнадцятий дослід в центрі плану. Модель вважається адекватною якщо розбіжність між вимірним значенням відгуку в центральній точці плану і розрахованим його значення знаходиться в межах похибки експерименту.

Для сплавів різних систем поверхні відгуку, як функції між властивостями та вмістом легуючих компонентів, графічно відображають у вигляді ліній рівного рівня. Такі графіки зручні і наглядні, але лише при трьох факторах. При більшій кількості факторів можна будувати розрізи різного типу, проте це не дуже зручно. В такому випадку краще застосовувати методи теорії оптимізації.

Завдання комп'ютерного практикуму

Побудувати матрицю симплекс-решітчастого плану для заданої викладачем властивості сплаву системи Al-Mg-Zn. По даним експерименту "склад - властивості" побудувати математичну модель четвертого порядку. По результатам моделювання побудувати графічну інтерпретацію моделі у вигляді ліній рівного рівня.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Заповнити матрицю симплекс-решітчастого плану з факторами (компонентами сплаву), які виражені у долях, у відповідності до рисунку 5.1 г та результатами вимірювань вказаної викладачем властивості сплаву системи Al-Mg-Zn.
2. Розрахувати коефіцієнти математичної моделі четвертого порядку з допомогою формули (5.8).
3. Перевірити адекватність моделі.
4. Побудувати графік ліній рівного рівня з допомогою комп'ютерної програми "EqLine", яка наведена в додатку. В програмі "EqLine" потрібно задати коефіцієнти математичної моделі та рівні функції відгуку, які потрібно виводити.
5. Сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити протокол виконання комп'ютерного практикуму.

Контрольні запитання

1. Чому в експериментах типу “склад-властивості” неможливо використовувати активні факторні плани?
2. Як визначається симплекс?
3. Які типи математичних моделей застосовують у симплекс-загратованих планах?
4. Для чого дублюються вимірювання відгуку в центрі симплекс-загратованих планів?
5. Що розуміється під “покроковим пошуком”?
6. Які особливості має перевірка адекватності моделі при застосуванні симплекс-загратованого планування?
7. Що розуміється під лініями рівного рівня?

Література

1. Винарский М.С., Лурье М.В. Планирование эксперимента в технологических исследованиях. – Киев. – Техніка. – 1975. – 168 с.
2. Володарский Е.Т., Малиновский Б.Н., Туз Ю.М. Планирование и организация измерительного эксперимента. - Киев. - Головное издательство издательского объединения «Вища школа». - 1987. – 280 с.

ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМІВ ЗМІЦНЮЮЧОЇ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ СТАЛІ З ВИКОРИСТАННЯМ ФАКТОРНИХ ПЛАНІВ ПЕРШОГО ТА ДРУГОГО ПОРЯДКУ

Мета роботи: опанування методики побудови експериментальних залежностей з використанням композиційних планів першого та другого порядку від двох факторів, а також методів Гаусса-Зайделя та дихотомії для пошуку екстремуму на поверхні відгуку.

Теоретичні відомості

Одним з основних параметрів, яким необхідно управляти при термічній обробці (ТО) матеріалів, є температурний режим процесу. В значній мірі від режимів зміцнюючої ТО, до числа яких, в першу чергу, відносяться температура гартування $T_{гарт}$ і температура відпуску $T_{відп}$ залежить працездатність виробу (Y). Таким чином, математичну модель, що описує вплив $T_{гарт}$ і $T_{відп}$, які є факторами в експерименті, на працездатність Y , що є відгуком, можна представити у вигляді функціональної залежності типу $Y = f(x_1, x_2)$:

$$Y = Y(T_{гарт}, T_{відп}). \quad (6.1)$$

На практиці для побудови залежності (6.1) досить часто використовують математичні моделі першого або другого порядку. Лінійна модель першого порядку для двох факторів описується рівнянням:

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2, \quad (6.2)$$

квазілінійна модель першого порядку для двох факторів виглядає як:

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2, \quad (6.3)$$

а многочлен другого ступеня також від двох параметрів має загальний вигляд:

$$Y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2, \quad (6.4)$$

де a_j – коефіцієнти моделі, які потрібно визначити по експериментальним даним; x_j – фактори моделі.

Члени математичних моделей (6.2), (6.3) та (6.4) мають конкретний зміст:

1) a_0 - постійна складова (вільний член), свого роду фон, на якому проявляється дія факторів x_1 і x_2 ;

2) a_1x_1 і a_2x_2 – члени многочлену, що описують з урахуванням знака прямо пропорційні (лінійні) впливи на відгук Y змінних x_1 і x_2 ;

3) $a_{11}x_1^2$ і $a_{22}x_2^2$ - члени многочлену другого порядку, що відображають нелінійний вплив факторів x_1 і x_2 на властивість Y ;

4) $a_1x_1x_2$ – член многочлену, який дає оцінку ефекту взаємодії факторів x_1 і x_2 (квазілінійність).

У випадку математичної моделі впливу температур гартування та відпуску другого порядку в загальному вигляді можна представити так:

$$Y = a_0 + a_1T_{\text{запм}} + a_2T_{\text{відн}} + a_{12}T_{\text{запм}}T_{\text{відн}} + a_{11}T_{\text{запм}}^2 + a_{22}T_{\text{відн}}^2, \quad (6.5)$$

При розробці ідентифікаційних (тобто побудованих по експериментальним даним) багатовимірних математичних моделей, які будуються по результатам багатofакторного експерименту, зручно використовувати так званий активний експеримент. Його основна ідея полягає в тому, що всі фактори змінюються одночасно, але по певному алгоритму. Цей алгоритм має назву “матриця плану”. Розрізняють декілька типів активних експериментів: повний факторний експеримент першого та другого порядку (ПФЕ P^k , де k - кількість факторів в моделі; P - кількість рівнів варіювання факторів), композиційні ортогональні та рототабельні плани другого порядку, не композиційні плани другого порядку. Вони дозволяють будувати лінійні, квазілінійні та нелінійні математичні моделі.

В активному експерименті використовують нормовані безрозмірні фактори моделі (змінні експерименту). Для нормування факторів у природних розмірностях використовують співвідношення:

$$Z_j = \frac{x_j - x_{jc}}{x_{j\max} - x_{jc}} = \frac{x_j - x_{jc}}{x_{jc} - x_{j\min}}, \quad (6.6)$$

$$x_{jc} = \frac{x_{j\min} + x_{j\max}}{2}, \quad (6.7)$$

де $x_{j\max}$, $x_{j\min}$ – граничні значення варіювання незалежних змінних (факторів) у природних розмірностях; j – номер фактору.

Як видно значення нормованих факторів змінюється в межах $-1 \leq Z_j \leq +1$.

При проведенні експерименту та побудові математичної моделі ПФЕ 2^k фактори приймають значення ± 1 . Але для зручності в матриці плану їх позначають тільки знаками “+” або “-”. Матриця плану для побудови квазілінійної двофакторної моделі з нормованими факторами наведена в таблиці 6.1. Виділена частина матриці (стовпчики 3 та 4) показує величини факторів при проведенні експерименту. Стовпчик із номером 6 містить результати вимірювань відгуку, а стовпчики 2 та 5 застосовуються для розрахунків коефіцієнтів. По результатам експерименту, який позначається як ПФЕ 2^2 , можна побудувати квазілінійну модель типу (6.3), яка є частиною (6.5):

$$Y = b_0 + b_1Z_1 + b_2Z_2 + b_{12}Z_1Z_2, \quad (6.8)$$

де b_j – коефіцієнти моделі з нормованими факторами Z_j .

Розраховуються значення коефіцієнтів b_j з допомогою виразу:

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N Z_{ji} Y_i}{N}, \quad (6.9)$$

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

Таблиця 6.1

Матриця плану ПФЕ 2^2

i	Z_0	Z_1	Z_2	$Z_1 Z_2$	Y_i	\hat{Y}_i	$(Y_i - \hat{Y}_i)^2$	$\frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i} 100\%$
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	+	-	-	+	Y_1	\hat{Y}_1	$(Y_1 - \hat{Y}_1)^2$	$\frac{Y_1 - \hat{Y}_1}{Y_1} 100\%$
2	+	+	-	-	Y_2	\hat{Y}_2	$(Y_2 - \hat{Y}_2)^2$	$\frac{Y_2 - \hat{Y}_2}{Y_2} 100\%$
3	+	-	+	-	Y_3	\hat{Y}_3	$(Y_3 - \hat{Y}_3)^2$	$\frac{Y_3 - \hat{Y}_3}{Y_3} 100\%$
4	+	+	+	+	Y_4	\hat{Y}_4	$(Y_4 - \hat{Y}_4)^2$	$\frac{Y_4 - \hat{Y}_4}{Y_4} 100\%$

Нормування факторів виконується, в першу чергу, для зручності розрахунків коефіцієнтів моделі, які зводяться до знаходження алгебраїчної суми відгуків Y_i із знаками j -го стовпчика поділеної на кількість експериментальних точок плану експерименту. А по-друге, при нормованих значеннях змінних величини коефіцієнтів при факторах показують їх силу впливу на відгук Y . Знак коефіцієнту показує напрямок впливу відповідного фактору на відгук Y .

Після побудови математичної моделі потрібно провести перевірку її адекватності. Ця перевірка виконується або з допомогою критерію Фішера, або по таблиці залишків. Критерій Фішера визначається як:

$$F = \frac{S_{ad}^2}{S_6^2}, \quad (6.10)$$

де S_{ad}^2 – дисперсія адекватності, яка характеризує похибку побудованої моделі; S_e^2 – дисперсія відтворюваності, яка характеризує випадкову похибку експерименту. Потрібно зауважити, що в правильно побудованому експерименті його похибка має виключно випадковий характер.

Для використання критерію Фішера необхідно мати інформацію стосовно оцінки величини випадкової похибки, яка оцінюється по дисперсії відтворюваності S_e^2 . Тому потрібно виконати паралельні вимірювання. Вони виконуються або в точках плану ($Y_1 \dots Y_4$), або в додаткові точки в центрі плану, що на практиці застосовується значно частіше (в цьому випадку і кількість експериментів суттєво зменшується). До того ж потрібно додати, що при дійсно лінійній моделі в центральній точці плану з координатами $Z_1 = 0$ та $Z_2 = 0$ виміряна величина відгуку $Y_0 \approx b_0$.

Дисперсія відтворюваності у випадку декількох вимірювань в центрі плану розраховується по формулі:

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^m (Y_{0i} - \bar{Y}_0)^2}{m-1}, \quad (6.11)$$

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

Дисперсія адекватності розраховується за виразом:

$$S_{ad}^2 = \frac{q}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - \hat{Y}_i)^2, \quad (6.12)$$

де q – кількість дублів вимірювання відгуку Y в точках плану (якщо дублювання вимірів виконувалось в центрі плану, то $q = 1$); \hat{Y} - значення відгуку, яке розраховано з допомогою розробленої моделі (апроксимоване значення Y – стовпчик 7 таблиці 6.1); $\sum_{i=1}^N (Y_i - \hat{Y}_i)^2$ – сума значень стовпчика 8 таблиці 6.1, яка являє собою квадрат різниці виміряного значення відгуку (колонка 6 таблиці 6.1) та значення \hat{Y} (колонка 7 таблиці 6.1).

Розраховане значення критерію Фішера перевіряється на значимість шляхом порівняння із його табличним значенням. Якщо $F < F_{табл}$, то побудована математична модель с прийнятим рівнем статистичної значимості α адекватна експериментальним даним і її можна використовувати для подальших розрахунків. Рівень статистичної значимості α зв'язаний з довірчою ймовірністю P : $\alpha = P - 1$. Зазвичай вибирають $\alpha = 0,05$ ($P = 0,95$). $F_{табл}$ для заданого α вибирається з відповідної таблиці (додатки, таблиця Д.1) для ступенів свободи адекватності $f_{ad} = N$ та відтворюваності $f_e = m - 1$.

Якщо в процесі проведення експерименту вимірювання не дублювалися, то визначити дисперсію відтворюваності S_{ϵ}^2 неможливо. Тоді визначити адекватність моделі можна по таблиці залишків, які розраховуються в кожній точці плану як виражена у відсотках оцінка відносної похибки між вимірним значенням відгуку та значенням \hat{Y} (стовпчик 9 таблиці 6.1). В разі адекватної моделі величина залишків не повинна значно перевищувати відносну похибку експерименту.

У випадку коли лінійна або квазілінійна модель визначена як неадекватна, потрібно будувати нелінійну модель (другого порядку):

$$Y = b_0 + b_1 Z_1 + b_2 Z_2 + b_{12} Z_1 Z_2 + b_{11} Z_1^2 + b_{22} Z_2^2. \quad (6.13)$$

Для цього можна використати композиційний план експерименту другого порядку. Цей план базується на розглянутому вище плані ПФЕ 2^k першого порядку. Точки плану ПФЕ 2^k доповнюються додатковими так званими “зірковими” точками, які розташовуються на відстані “зіркового плеча” від центру плану, та точкою в центрі плану. Розташування додаткових точок та їх кількість визначають властивості матриці плану експерименту: ортогональність або рототабельність. Для випадку двох факторів розташування експериментальних точок в факторному просторі для ортогонального композиційного плану (ОКП) другого порядку показано на рис. 6.1.

Точки композиційного ортогонального плану складаються з точок повного факторного експерименту №1... №4, “зіркових” точок №5... №8 та центральної точки №9. Величина “зіркових” плечей залежить від кількості факторів (для двох факторів $\pm \alpha_{1,2} = 1$).

Ортогональність матриці плану дозволяє при побудові математичної моделі отримати незалежні оцінки коефіцієнтів при її членах. Це достатньо зручно, бо в цьому випадку можна оцінити значимість коефіцієнтів моделі при її факторах і не значимі вилучити із рівняння без повторних перерахунків. Потрібно зауважити, що виконується **оцінка** коефіцієнтів, а не їх точне визначення тому, що в будь якому експерименті завжди існує похибка, яка впливає на розраховану величину коефіцієнтів.

Для того, щоб план другого порядку був ортогональним потрібно забезпечити дві умови:

$$\sum_{u=1}^N Z_{0u} Z_{iu}^2 = 0 \text{ та } \sum_{u=1}^N Z_{iu}^2 Z_{ju}^2 = 0. \quad (6.14)$$

Перша із умов (6.14) може бути виконана шляхом перетворення квадратичних змінних:

$$Zx'_i = Z_i^2 - \frac{\sum_{u=1}^N Z_{iu}^2}{N} = Z_i^2 - \bar{Z}_i^2. \quad (6.15)$$

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

$$\bar{Z}_i^2 = \frac{2^k + 2d^2}{2^k + 2k + 1}. \quad (6.16)$$

Якщо позначити $\bar{Z}_i^2 = \varphi$, тоді:

$$\varphi = \frac{2^k + 2d^2}{N}. \quad (6.17)$$

Знаменник рівняння (6.17) дорівнює $N = 2^k + 2k + 1$ де 2^k - кількість точок ядра плану ПФЕ 2^k , $2k$ - кількість “зіркових” точок, 1 - одна нульова точка (центр плану).

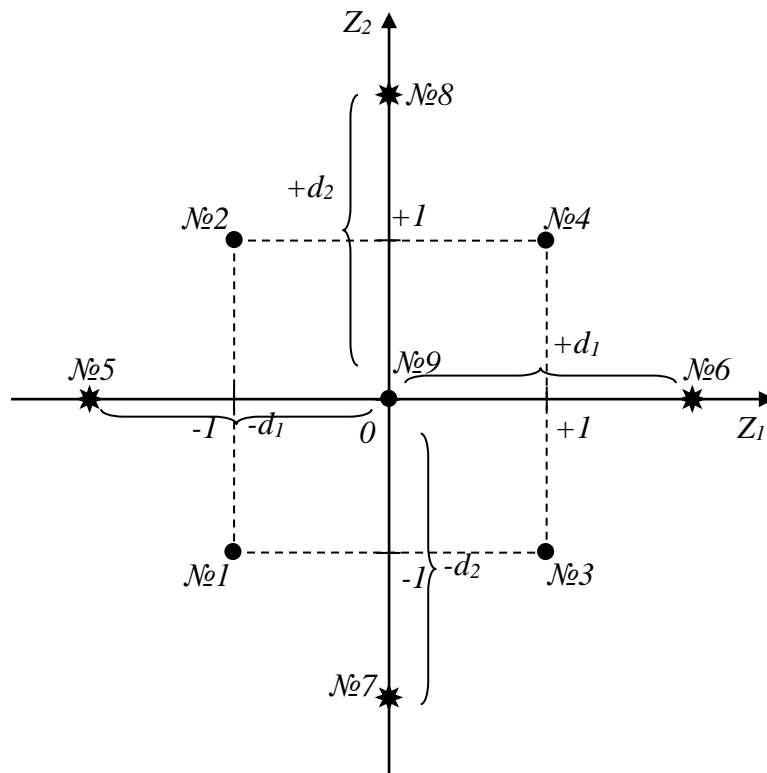


Рис. 6.1 Факторний простір та точки композиційного ортогонального двофакторного плану. №1... №4 - точки повного факторного експерименту; №5... №8 “зіркові” точки; №9 - центральна точка; $\pm d_{1,2}$ - числове значення “зіркових” плеч.

З умови ортогональності вектор-стовбців квадратичних членів моделі (6.13) можна записати ще одне рівняння:

$$2^k(1 - \varphi)^2 - 4\varphi(d^2 - \varphi) + 2(k - \varphi)\varphi^2 + \varphi^2 = 0. \quad (6.18)$$

Розв’язавши сумісно рівняння (6.14) та (6.16) можна отримати загальні формули для визначення величин φ та d при побудові ортогональних планів другого порядку:

$$\varphi = \sqrt{\frac{2^k}{N}}, \quad (6.19)$$

$$d = \sqrt{\frac{N\varphi - 2^k}{2}}. \quad (6.20)$$

Якщо ядром композиційного плану є план ПФЕ 2^2 , то кількість точок плану буде $N = 2^2 + 2 \cdot 2 + 1 = 9$. А використовуючи (6.19) та (6.20) отримуємо $\varphi = 2/3 \approx 0,6667$; $d = 1,0000$.

В таблиці 6.2 наведено матрицю плану композиційного ортогонального плану другого порядку для двох факторів. Виділено, як і таблиці 6.1, стовпчики із значеннями факторів в реальному експерименті.

Таблиця 6.2

Матриця плану ОКП другого порядку для двох факторів

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

Забезпечив ортогональність композиційного плану можна визначити коефіцієнти моделі незалежно друг від друга по формулі:

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N Z_{iu} Y_u}{\sum_{u=1}^N Z_{iu}^2}, \quad (6.21)$$

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

Враховуючи перетворення квадратичних членів моделі, які були виконані для ортогоналізації матриці плану, потрібно скорегувати вільний член рівняння (6.13):

$$b_0 = b'_0 - \sum_{1 < i < j} \varphi b_{ij}. \quad (6.22)$$

Адекватність моделі в даному випадку можна визначати за критерієм Фішера. Проте, вже зазначено вище, на практиці для цього частіше аналізують таблицю залишків.

Коефіцієнти моделі також можна розрахувати використовуючи метод найменших квадратів і його програмну реалізацію, яка описана в комп'ютерному практикумі № 4.

Після побудови математичної моделі можна сформулювати задачу оптимізації, в якій побудована математична модель є цільовою функцією. *Цільова функція - функція кількох змінних, що підлягає оптимізації (мінімізації або максимізації) з метою вирішення певної оптимізаційної задачі. Термін використовується в математичному програмуванні, дослідженні операцій, лінійному програмуванні, теорії статистичних рішень та інших областях математики в першу чергу прикладного характеру. Крім цільової функції в задачі оптимізації для змінних можуть бути задані обмеження у вигляді системи рівностей або нерівностей.*

Обмеження, що накладаються на область зміни факторів, являють собою границі експерименту. Бажано при виконанні оптимізації не виходити за них, так як в цьому випадку побудована математична модель може давати не адекватну інформацію (область екстраполяції). Ще одне зауваження полягає в тому, що модель побудована в безрозмірних нормованих координатах, а результати потрібно отримати у природних координатах. Проте зворотній перехід від нормованих координат до природних зручно робити вже після отримання результатів оптимізації.

Таким чином задача оптимізації буде виглядати як:

$$\left\{ \begin{array}{l} Y = b_0 + b_1 Z_1 + b_2 Z_2 + b_{12} Z_1 Z_2 + b_{11} Z_1^2 + b_{22} Z_2^2, \\ Z_{1\min} \leq Z_1 \leq Z_{1\max}, \\ Z_{2\min} \leq Z_2 \leq Z_{2\max} \end{array} \right. \quad (6.23)$$

Потрібно також задати точність E , з якою бажано отримати результати розрахунків. Точність розрахунків як правило визначається точністю експерименту при вимірюванні відгуку Y .

В найпростішому варіанті розв'язку задачі багатовимірної оптимізації режимів термообробки (6.23) використовується підхід, коли двох факторна система розбивається на дві незалежні системи, які оптимізуються окремо:

$$Y = a'_0 + a'_1 T_{\text{гарт}} + a'_{11} T_{\text{гарт}}^2, \quad (6.24)$$

$$Y = a''_0 + a''_2 T_{\text{відн}} + a''_{22} T_{\text{відн}}^2. \quad (6.25)$$

У цьому випадку залежність $Y = f(T_{\text{гарт}})$ вивчається при деякій заданій постійній температурі відпуску, а залежність $Y = f(T_{\text{відн}})$ оптимізується при визначеному оптимальному температурі гартування. Такий спосіб не завжди дає найкращий результат. Набагато

кращим є одночасне варіювання температур гартування і відпуску, коли вдається враховується також взаємодії $b_{12}Z_1Z_2$, в рівнянні (6.13).

Для отримання рекомендацій по оптимізації режимів ТО можна використовувати Метод Гаусса - Зейделя або метод “по координатного спуску”, який полягає в почерговому фіксуванні одного з факторів і пошуку екстремуму при варіюванні іншого. До переваги цього методу можна віднести його простоту та можливість використання простих методів одновимірної оптимізації, наприклад метод *дихотомії* (ділення відрізка навпіл). Всі розрахунки виконуються в області, яка визначена границями задачі (6.23). Алгоритм методу дихотомії наступний:

Крок 1. Задати $Z_m = (a + b)/2$ та $L = b - a$ (тут a та b межі факторного простору). Розрахувати $Y_m = F(Z_m)$.

Крок 2. Покласти $Z_1 = a + L/4$ та $Z_2 = b - L/4$. Зазначимо, що точки Z_1, Z_m та Z_2 поділяють інтервал (a, b) на чотири рівні частини. Розрахувати $Y_1 = F(Z_1)$ та $Y_2 = F(Z_2)$.

Крок 3. Порівняти Y_1 та Y_m . Якщо $Y_1 < Y_m$, виключити інтервал (Z_m, b) , позначивши $b = Z_m$. Середньою точкою нового інтервалу стає точка Z_1 . Тобто потрібно встановити $Z_m = Z_1$. Перейти на крок 5.

Крок 4. Порівняти Y_2 та Y_m . Якщо $Y_2 < Y_m$, виключити інтервал (a, Z_m) , позначивши $a = Z_m$. Встановити $Z_m = Z_2$ (тому, що середньою точкою нового інтервалу стає точка Z_2). Перейти на крок 5.

Якщо $Y_2 \geq Y_m$, виключити інтервали (a, Z_1) та (Z_2, b) . Встановити $a = Z_1$ та $b = Z_2$. Зазначимо, що Z_m продовжує залишатись середньою точкою нового інтервалу. Перейти на крок 5.

Крок 5. Розрахувати $L = b - a$. Якщо величина $|L|$ мала (тобто $|L| < E$, де E – задана точність розрахунків) закінчити пошук і записати результат обчислень. В протилежному випадку повернутися на крок 2.

Наприкінці потрібно зробити декілька зауважень:

- на кожній ітерації алгоритму виключається точно половина інтервалу;
- середня точка інтервалів, які послідовно виключаються, завжди співпадає з однією із пробних точок Z_1, Z_2 або Z_m , що були знайдені на попередній ітерації. Тобто на кожній ітерації потрібно розраховувати не більше двох значень цільової функції;
- якщо проведено N розрахунків значень цільової функції, то довжина отриманого

інтервалу складає $\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{N}{2}}$ від величини вихідного інтервалу.

Теоретично даний метод ефективний у випадку єдиного екстремуму і на практиці може виявитися занадто повільним. Проте він має більш ефективну модифікацію, яка відома як метод *градієнтного спуску* (або підйому). В цьому методі напрям зміни функції відгуку вибирається відповідно до напрямку її градієнту, оскільки саме він визначає "якнайшвидшу" зміну функції.

Завдання комп'ютерного практикуму

Побудувати матрицю плану ПФЕ 2^2 чи ОКП. По результатам експерименту побудувати математичну модель та знайти оптимальні значення режимів ТО, використовуючи методи Гаусса-Зайделя та дихотомії.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Виконати нормування факторів моделі з допомогою виразів (6.6) та (6.7).
2. Побудувати матрицю плану ПФЕ 2^2 та провести обчислення коефіцієнтів математичної моделі (6.8) з допомогою виразу (6.9). Перевірити побудовану модель на адекватність або за критерієм Фішера, або по таблиці залишків. Якщо модель адекватна, по перейти до оптимізації параметрів ТО. Якщо модель не адекватна, то побудувати матрицю плану ОКП та провести обчислення коефіцієнтів математичної моделі (6.13) з допомогою виразів (6.21) та (6.22) або використовуючи програму, що реалізує метод найменших квадратів. Перевірити побудовану модель на адекватність.
3. Сформулювати оптимізаційну задачу записавши цільову функцію (математичну модель) і зазначивши границі факторного простору, як показано виразом (6.23).
4. Знайти оптимальні значення режимів ТО, використовуючи методи Гаусса-Зайделя та дихотомії.
5. Записати результат оптимізації, виразивши фактори у природних розмірностях
$$x_j = Z_j(x_{j_{\max}} - x_{j_c}) + x_{j_c} \quad (6.26)$$
6. Сформулювати висновки по роботі.
7. Оформити комп'ютерний практикум.

Контрольні запитання

1. Яку математичну модель можна побудувати використовуючи ПФЕ 2^2 ?
2. Який вигляд мають змінні в факторних експериментах ?
3. Як можна довести адекватність математичної моделі, яка побудована на основі експериментальних даних ?
4. Що оцінюють дисперсії відтворюваності та адекватності ?

5. Для побудови яких моделей використовують експеримент з ОКП ?
6. Чому експеримент з ОКП є композиційним і ортогональним ?
7. Яка ідея полягає в основі методу оптимізації Гаусса – Зайделя ?
8. Поясніть алгоритм методу дихотомії.

Література

1. Володарский Е.Т., Малиновский Б.Н., Туз Ю.М. Планирование и организация измерительного эксперимента. - Киев. - Главное издательство издательского объединения «Вища школа». - 1987. – 280 с.
2. Винарский М.С., Лурье М.В. Планирование эксперимента в технологических исследованиях. – Киев. – Техніка. – 1975. – 168 с.
3. Рейклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике. Том 1.– М.- Мир. – 1986. -349 с.

ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЖИМІВ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ НЕРЖАВІЮЧОЇ МАРТЕНСИТНО-СТАРІЮЧОЇ СТАЛІ З ВИКОРИСТАННЯМ ПЛАНІВ БОКСА- БЕНКЕНА

Мета роботи: опанування методики побудови математичних моделей шляхом проведення факторного експерименту з використанням симетричного не композиційного плану Бокса-Бенкена та методу випадкового пошуку для оптимізації параметрів термічної обробки.

Теоретичні відомості

Задовільна ударна в'язкість високоміцних сталей при криогенних температурах забезпечується наявністю в структурі деякої кількості аустеніту. У мартенситно-старіючих сталях аустеніт можна отримати одним із таких способів:

- 1) старінням в нижньому температурному інтервалі двофазної області $\alpha + \gamma$;
- 2) гартуванням із межі критичного інтервалу $A_{c3} + 50$ градусів;
- 3) гартуванням від температур трохи вище A_{c3} і подальшим старінням при температурах, близьких до A_{c1} .

Третій спосіб є найбільш оптимальним в забезпеченні необхідного комплексу властивостей. Він поєднує достатню ударну в'язкість при криогенних температурах і міцність.

Відповідно з цим способом при нагріванні сталі до температур вище A_{c3} відбувається повне $\alpha + \gamma$ перетворення, яке йде з перерозподілом легуючих елементів між аустенітом, що з'являється і зберігається α - фазою.

При переході в однофазну аустенітну область, що виникла при $\alpha + \gamma$ перетворенні, неоднорідність зберігається в певній мірі і надалі успадковується мартенситом. Це служить причиною того, що у частини кристалів температура A_{c1} значно знижується в порівнянні з середнім складом. Тому старінням при температурі нижче A_{c1} вдається отримати в структурі сталі певну кількість вторинного аустеніту. В іншій частині мартенситної матриці відбувається звичайне старіння. Кількісне співвідношення утвореного при старінні вторинного аустеніту і зістареного мартенситу визначає механічні властивості і, в свою чергу, залежить від поєднання параметрів режиму термічної обробки.

У даному комп'ютерному практикумі потрібно оцінити вплив параметрів термічної обробки на структуру і механічні властивості сталі типу ОЗХПН9К9М5Т. У залежності

від області застосування виробів з даної сталі слід звернути увагу на вибір відповідних параметрів оптимізації.

Для вибору області варіювання параметрів остаточної термічної обробки розглянемо вплив температури T_n одноденного нагріву на структуру і фазовий склад сталі, попередньо загартованої при T_z (рис. 7.1).

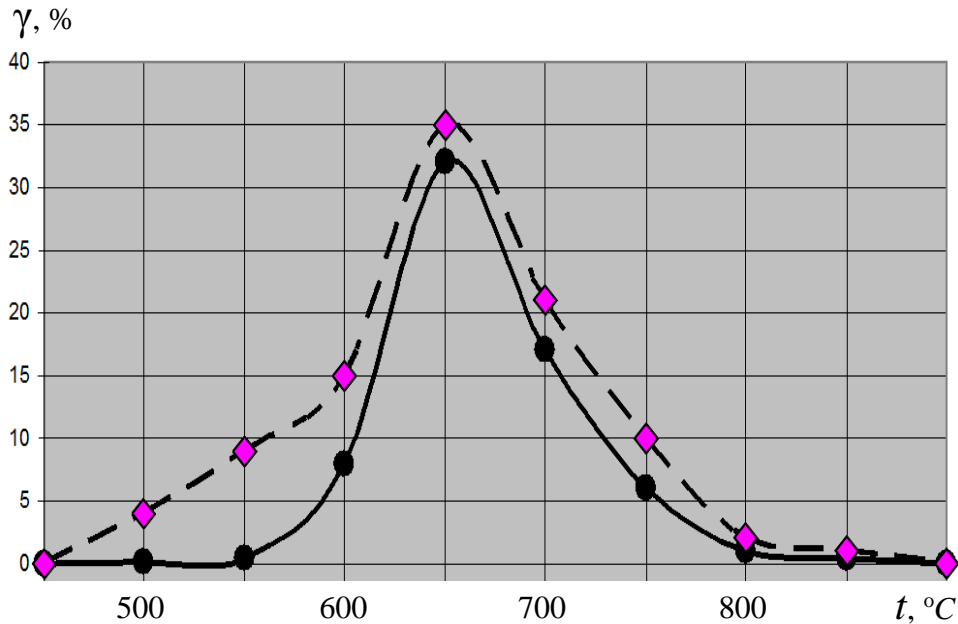


Рис. 7.1. Вплив температури нагріву на кількість аустеніту в сталі типу ОЗХПН9К9М5Т при різній температурі попереднього гартування

Після витримки при температурі 550 °C в структурі з'являються ділянки аустеніту у вигляді двофазних пакетів складу аустеніт + мартенсит. З підвищенням температури витримки до 600 °C і вище кількість двофазних пакетів збільшується, втрачається локальність їх розташування. При нагріванні до 650 °C одночасно з'являється і залишковий аустеніт між мартенситними кристалами в смугах, відповідних між вісним ділянкам дендритної структури злитків. Вторинний аустеніт у складі двофазних пакетів і залишковий аустеніт співіснують в мікроструктурі після нагрівання аж до 750 °C, кількість двофазних пакетів стає незначним, а кількість залишкового аустеніту збільшується. Після гартування від 800 °C лише на деяких ділянках присутня невелика кількість залишкового аустеніту. При повторному нагріванні металу, попередньо загартованого від 800 °C, температура появи вторинного аустеніту в складі двофазних пакетів зміщується вниз (рис. 7.1, верхня крива) через неоднорідності, що виникли в ході попереднього $\alpha + \gamma$ - перетворення, і які збереглися.

Для визначення впливу параметрів термічної обробки на механічні властивості можна застосувати метод факторного планування експерименту. Використовуються композиційні та не композиційні плани. Під композиційними планами розуміють послідовну добудову лінійних планів до планів другого порядку (дивись комп'ютерний практикум №6). Однак принцип композиційного планування є не завжди зручним. Наприклад, коли заздалегідь відомо, що область факторного простору (область експерименту) є нелінійною. Тобто в цій області існує екстремум функції відгуку (властивості, величину якої оптимізують). Тому значно зручніше і економніше реалізовувати відразу план високого порядку (другого та більше) та провести для цього необхідну серію дослідів. Такі плани будуть не композиційними.

При застосуванні факторних планів фактори у природній розмірності перетворюють у нормований без розмірний вигляд. В цьому випадку вони варіюються на трьох рівнях $0; \pm 1$. Фактори нормуються таким же чином, як у інших факторних експериментах (дивись комп'ютерний практикум № 6). Варіант нормування факторів для випадку чотирьох змінних наведено в таблиці 7.1.

Таблиця 7.1.

Схема кодування факторів

Фактори (нормовані)	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4
Номер фактору j	1	2	3	4
Основний рівень ($x_j = 0$)	x_1 середнє	x_2 середнє	x_3 середнє	x_4 середнє
Верхній рівень ($x_j = +1$)	x_1 максимум	x_2 максимум	x_3 максимум	x_4 максимум
Нижній рівень ($x_j = -1$)	x_1 мінімум	x_2 мінімум	x_3 мінімум	x_4 мінімум

Тут позначено маленькими літерами x_j нековдані фактори з природними розмірностями та великими літерами Z_j у кодованому безрозмірному вигляді.

При вирішенні багатьох завдань важливо мати однакову точність передбачення для точок, рівновіддалених від центру плану по будь-якому напрямку, тобто в цьому випадку говорять, що план повинен бути ротатабельним. Кількісною мірою близькості плану до ротатабельності є так званий фактор несферичності, що є відношенням максимального розмаху дисперсії передбачення до її середнього значення на сфері одиничного радіусу. Для ротатабельних планів цей фактор дорівнює нулю.

Плани можуть бути також симетричними і несиметричними. Ознакою симетричності відносно центру експерименту є умова коли сума елементів будь-якого стовпця матриці планування дорівнює нулю:

$$\sum_{i=1}^N Z_{ui} = 0, i = 1, 2, \dots, k, \quad (7.1)$$

де k - номер фактору; N – кількість точок плану експерименту. Як видно з умови (7.1) точки плану розташовані симетрично відносно центру плану.

Одним із поширених на практиці симетричних некомпозиційних планів є плани Бокса-Бенкена. Симетричний некомпозиційний план Бокса-Бенкена (матриця плану) для випадку чотирьох факторів наведено в таблиці 7.2.

Як видно з таблиці 7.2 в центрі плану (точки 25, 26 та 27) вимірювання дублюються на основному рівні. Це необхідно для визначення дисперсії досліду.

Математична модель, яку можна побудувати в експерименті, який виконано за планом Бокса-Бенкена, має загальний вигляд:

$$Y = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq k} b_i Z_i + \sum_{1 \leq i < j \leq k} b_{ij} Z_i Z_j + \sum_{1 \leq i < k \leq q} b_i Z_i^2. \quad (7.2)$$

Коефіцієнти моделі розраховуються за наступними співвідношеннями:

$$b_0 = C_1 \sum_{i=1}^N Y_i - C_2 \sum_{u=1}^k \sum_{i=1}^N Z_{ui}^2 Y_i, \quad (7.3)$$

$$b_u = C_3 \sum_{i=1}^N Z_{ui} Y_i, \quad (7.4)$$

$$b_{uq} = C_4 \sum_{i=1}^N (Z_u Z_q)_i Y_i, \quad (7.5)$$

$$b_{uu} = C_5 \sum_{i=1}^N Z_{ui} Y_i + C_6 \sum_{u=1}^k \sum_{i=1}^N Z_{ui}^2 Y_i - C_7 \sum_{i=1}^N Y_i, \quad (7.6)$$

де C_j – допоміжні константи, величини яких залежать від кількості факторів в експерименті.

Перед тим, як використовувати для розрахунків формули (7.3) – (7.6) потрібно доповнити матрицю плану (таблиця 7.2) додатковими стовпчиками, які зазначають ефекти взаємодії та квадрати факторів.

Потрійне повторення досліду на основному рівні дозволяє розрахувати дисперсію відтворюваності досліду S_g^2 за формулою:

$$S_g^2 = \frac{\sum_{g=1}^m (Y_{0g} - \bar{Y}_0)^2}{m-1}, \quad (7.7)$$

де Y_{0g} - результат g -го дубля (повтору) вимірювання Y в центрі досліду; \bar{Y}_0 - середнє арифметичне значення всіх m дублів досліду в центральній точці.

Таблиця 7.2.

План Бокса-Бенкена для чотирьох факторів

N	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4	Y
1	+	+	0	0	Y_1
2	-	+	0	0	Y_2
3	+	-	0	0	Y_3
4	-	-	0	0	Y_4
5	0	0	+	+	Y_5
6	0	0	-	+	Y_6
7	0	0	+	-	Y_7
8	0	0	-	-	Y_8
9	+	0	0	+	Y_9
10	-	0	0	+	Y_{10}
11	+	0	0	-	Y_{11}
12	-	0	0	-	Y_{12}
13	0	+	+	0	Y_{13}
14	0	-	+	0	Y_{14}
15	0	+	-	0	Y_{15}
16	0	-	-	0	Y_{16}
17	+	0	+	0	Y_{17}
18	-	0	+	0	Y_{18}
19	+	0	-	0	Y_{19}
20	-	0	-	0	Y_{20}
21	0	+	0	+	Y_{21}
22	0	-	0	+	Y_{22}
23	0	+	0	-	Y_{23}
24	0	-	0	-	Y_{24}
25	0	0	0	0	Y_{25}
26	0	0	0	0	Y_{26}
27	0	0	0	0	Y_{27}

Дисперсії коефіцієнтів моделі S_b^2 та їх середньоквадратичні похибки S_b розраховуються за формулами:

$$\left. \begin{aligned} S_{b_0}^2 &= C_1 S_\epsilon^2, & S_{b_0} &= C_7 S_\epsilon, \\ S_{b_i}^2 &= C_3 S_\epsilon^2, & S_{b_i} &= C_8 S_\epsilon, \\ S_{b_{ij}}^2 &= C_4 S_\epsilon^2, & S_{b_{ij}} &= C_9 S_\epsilon, \\ S_{b_{ii}}^2 &= (C_5 + C_6) S_\epsilon^2, & S_{b_{ii}} &= C_{10} S_\epsilon. \end{aligned} \right\} (7.9)$$

Значення допоміжних констант для випадку чотирьох факторів в формулах (7.3) – (7.9) наступні: $C_1 = 0,33333$; $C_2 = 0,16667$; $C_3 = 0,08333$; $C_4 = 0,75000$; $C_5 = 0,12500$; $C_6 = 0,06250$; $C_7 = 0,57730$; $C_8 = 0,28867$; $C_9 = 0,50000$; $C_{10} = 0,43301$.

Адекватність моделі доводиться за критерієм Фішера (дивись комп'ютерний практикум № 6):

$$F = \frac{S_{ad}^2}{S_\epsilon^2}, \quad (7.10)$$

де S_{ad}^2 – дисперсія адекватності, яка характеризує похибку побудованої моделі; S_ϵ^2 – дисперсія відтворюваності, яка характеризує випадкову похибку експерименту. Дисперсія відтворюваності S_ϵ^2 визначається за формулою (7.7), а дисперсія адекватності S_{ad}^2 розраховується по формулі (6.12) із комп'ютерного практикума № 6. Зручність використання критерію Фішера полягає в тому, що перевірку гіпотези можна звести до порівняння з табличним значенням.

Якщо отримане розрахункове значення F - критерію більше наведеного в таблиці для відповідних ступенів свободи і вибраного рівня значимості, то це означає, що отримана модель не адекватна. В протилежному випадку коли розрахункове значення F – критерію менше за табличне, то модель вважається адекватною.

При вирішенні задачі оптимізації спочатку потрібно сформулювати її математичну постановку, яка описана в комп'ютерному практикумі № 6 (задача 6.21). Вона складається із цільової функції або математичної моделі (в даному випадку це побудоване рівняння (7.2), умов, які обмежують факторний простір, інших умов, якщо вони є, та заданої точності розрахунків. Точність розрахунків потрібна тому, що подібні задачі розв'язують з допомогою числових методів.

Існують методи оптимізації, які базуються за принципом прямого пошуку. До них відноситься метод випадкового пошуку, в основі якого закладено теорію ймовірності. Методи випадкового пошуку мають дуже прості алгоритми і можуть використовуватись у

випадку мультимодальних (тобто функцій, які мають не один екстремум) цільових функцій. Один з таких методів запропоновано Г. Бруксом.

Нехай факторний простір або простір проектування має форму квадрата, куба чи гіперкуба в залежності від розмірності R цільової функції Y і він розділений на кубічні комірки шляхом ділення на десять кожної сторони. Загальна кількість комірок визначається як $Q = 10^R$, тобто при $R = 2 \rightarrow Q = 10$, при $R = 3 \rightarrow Q = 1000$ і т.д. Ймовірність P знаходження принаймі однієї комірки із найбільш перспективних, доля яких складає f , після N спроб визначається як:

$$P = 1 - (1 - f)^N. \quad (7.11)$$

Використовуючи вираз (7.11) можна визначити кількість розрахунків цільової функції N , з яких знайдеться точка, що є шуканим результатом, при заданих P і f . P має зміст ймовірності, з якою отримується результат оптимізації, і, як правило, вибирають $P \geq 0,95$. Число f показує у скільки разів потрібно зменшити первісні розміри факторного простору і визначається заданою точністю. В свою чергу точність розрахунків задається виходячи із точності, якою вимірюються параметри моделі (фактори) в експерименті. Зв'язок між N , P і f показано в таблиці 7.3.

Таблиця 7.3.

Кількість розрахунків цільової функції в залежності від P і f .

№	f	N		
		$P = 0,90$	$P = 0,95$	$P = 0,99$
1	0,10	22	28	44
2	0,08	24	32	49
3	0,06	32	41	63
4	0,04	56	73	113
5	0,02	114	148	238
6	0,01	229	298	458
7	0,05	459	598	919
8	0,001	2301	2994	4603

Звичайно, що при такій кількості розрахунків доцільно використовувати комп'ютерну реалізацію даного методу. Потрібно також зауважити, що результати розрахунку методом випадкового пошуку мають ймовірностний характер і метод не дозволяє безпосередньо знайти оптимальний розв'язок. Тому його частіше застосовують в комбінації з іншими методами оптимізації. Суттєвою перевагою цього методу є те, що

кількість розрахунків N не залежить від розмірності R факторного простіру, а це дуже скорочує величину N при багатфакторних дослідженнях.

Завдання комп'ютерного практикуму

Побудувати матрицю плану Бокса-Бенкена. По результатам експерименту побудувати математичну модель та знайти оптимальні значення режимів ТО мартенситно-старіючих сталей методом випадкового пошуку.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

В даній роботі план Бокса-Бенкена застосовується для оптимізації механічних властивостей мартенситно-старіючих сталей. Виходячи з того, що в оптимальній області механічні властивості зі зміною режимів термічної обробки змінюється швидше всього нелінійно, можна відразу будувати квадратичну модель типу (7.2). В якості факторів, що впливають на задані властивості, обраються: x_1 - температура остаточного гартування T_3 ; x_2 - температура старіння T_c ; x_3 - швидкість нагрівання до температури гартування U_n ; x_4 - тривалість старіння t_c .

1. Провести нормування факторів у відповідності з таблицею 7.1.
2. Заповнити матрицю плану Бокса-Бенкена (таблиця 7.2) із додатковими стовпчиками для розрахунку коефіцієнтів математичної моделі та результатами вимірювань вказаної викладачем властивості мартенситно-старіючої сталі.
3. Розрахувати коефіцієнти математичної моделі (7.2) з допомогою формул (7.3) – (7.6) та допоміжних констант.
4. Перевірити адекватність моделі за критерієм Фішера. Якщо модель адекватна, то перейти до виконання пункту 5. Якщо модель не адекватна, то сформулювати висновки до комп'ютерного практикуму з аналізом причин не адекватності моделі.
5. Перейти від нормованих факторів до факторів у природних розмірностях:

$$x_j = Z_j (x_{j\max} - x_{jc}) + x_{jc} \quad (7.12)$$

$$x_{jc} = \frac{x_{j\min} + x_{j\max}}{2}. \quad (7.13)$$

6. Сформулювати задачу оптимізації.
7. Розв'язати задачу оптимізації застосовуючи метод випадкового пошуку. Для цього спочатку визначити число f , яке показує у скільки разів потрібно зменшити факторний простір, наступним чином:
 - з'ясувати експериментальні похибки вимірювання кожного з факторів Δx_j ;

- ці похибки розділити на інтервали варіювання відповідних факторів і визначити f для кожного з факторів за формулою:

$$f_j = \frac{\Delta x_j}{x_{j\max} - x_{j\min}}. \quad (7.12)$$

- із визначених значень f_j вибрати найменше, яке і буде загальним числом f .

8. Визначити потрібну кількість розрахунків N користуючись таблицею 7.3, довірчою ймовірністю $P = 0,99$ та визначеним числом f .

9. Визначити оптимальне (максимальне) значення вказаної властивості мартенситно-старіючої сталі. Для цього використати комп'ютерну програму, алгоритм якої реалізує наступні кроки:

- крок 1: задати визначену кількість розрахунків N і відкрити масиви Y , $X1$, $X2$, $X3$ та $X4$ відповідної розмірності для відгуку Y та чотирьох факторів x_1, x_2, x_3, x_4 ;

- крок 2: задати мінімальні і максимальні значення кожного з факторів (наприклад q_1 та p_1, q_2 та p_2, q_3 та p_3, q_4 та p_4);

- крок 3: ініціалізувати генератор випадкових чисел (ГВЧ) та прив'язати його до таймеру комп'ютера (RANDOMIZE TIMER);

- крок 4: створити цикл від 1 до N , в якому з допомогою ГВЧ при кожному значенню лічильника отримати випадкові значення для кожного з факторів, підставити їх в рівняння розробленої математичної моделі (Y) і розрахований Y та визначені x_1, x_2, x_3, x_4 записати у відповідні масиви $Y(i), X1(i), X2(i), X3(i), X4(i)$;

- крок 5: записати у комірку MAX значення відгуку, яке знаходиться у елементі масиву $Y(1)$, а в комірки M1, M2, M3 та M4 значення, яке знаходиться у елементах масивів $X1(1), X2(1), X3(1), X4(1)$;

- крок 6: створити цикл від 1 до N , в якому визначати максимальне значення Y записавши його в комірку MAX (з допомогою оператора IF ___ THEN ___) і записавши в комірки, M1, M2, M3 та M4 відповідні значення факторів;

- крок 7: вивести на екран та на друк результати обчислень.

Враховуючи ймовірностний характер результатів обчислень методом випадкового пошуку обчислення потрібно провести декілька разів і із отриманих результатів вибрати найкращий.

10. Сформулювати висновки по роботі.

11. Оформити комп'ютерний практикум.

Контрольні питання

1. Як можна отримати аустеніт в мартенситно-старіючих сталях?
2. Які факторні плани експериментів називають композиційними, а які не композиційними?
3. В якому випадку зручно використовувати композиційні, а в якому не композиційні плани експериментів?
4. У якому вигляді використовують фактори у планованих експериментах?
5. Що забезпечує рототабельність плану експерименту?
6. Які факторні плани експериментів називають симетричними?
7. Для чого в плані Бокса-Бенкена дублюють опити в центрі плану?
8. Що розуміється під поняттям "адекватність моделі"?
9. Які переваги та недоліки має метод випадкового пошуку для розв'язку задач оптимізації?
10. Який зв'язок між кількістю розрахунків цільової функції N , ймовірністю P і числом f , яке характеризує порядок зменшення площини факторного простору?

Література

1. Новик Ф.С. Математические методы планирования экспериментов в металловедении. – М.: МИСИС. – 1979. – 96 с.
2. Хартман К. Планирование эксперимента в исследовании технологических процессов. – М.: Мир. – 1977. – 552 с.
3. Новик Ф.С., Арсов Я.Б. Оптимизация процессов технологии металлов методами планирования экспериментов. – М.: Машиностроение. – 1980. – 304 с.
4. Бодяко М.Н., Астапчик С.А., Ярошевич Г.Б. Мартенситно-старееющие стали. – Минск. – Наука и техника. – 1976. – 246 с.
5. Рейклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике. Том 1. – М.-Мир. – 1986. -349 с.

де x_1, x_2, \dots, x_k - фактори, які впливають на σ_ϵ та δ і є параметрами математичних моделей; $x_{j\min}$ та $x_{j\max}$ – мінімальні та максимальні значення, які можуть приймати фактори.

Вирази (8.1) та (8.2) являють собою цільові функції, (8.3) – (8.5) це обмеження, які визначають границі факторного простору. Припустимо, що нам потрібно максимізувати міцність. Тобто потрібно знайти таке поєднання значень факторів, при яких σ_ϵ або δ приймають максимальні значення. В такому випадку математичне формулювання задачі оптимізації включає в себе одну з цільових функцій та додаткові умови (8.3) – (8.4). Розв’язок такої задачі не задає значних труднощів. Коли потрібно одночасно знайти максимальні значення міцності і пластичності, немає ніякої впевненості, що цільові функції досягають максимуму в одній і тій же самій точці факторного простору. Така задача має назву “задача багатокритеріальної оптимізації”.

У задачі багатокритеріальної оптимізації виникає таке важливе поняття, як оптимальний план. З позицій математики такого плану не існує, так як, взагалі кажучи, не існує такого плану, який доставляв б одночасно знайти максимум двох функцій. Ця обставина і є причиною того, що методи вирішення багатокритеріальної задачі передбачають у тому чи іншому вигляді врахування думки особи, що приймає рішення (ОПР). В якості ОПР виступає фахівець з даної області знань, наприклад металознавець. Пояснимо роль ОПР розглядаючи два методи, які часто застосовують при вирішенні цих задач.

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

$$F = \alpha_1 f_1(x_1, x_2, \dots, x_k) + \alpha_2 f_2(x_1, x_2, \dots, x_k), \quad (8.6)$$

де $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$.

Якщо $\alpha_2 = 0$, то в розрахунок приймається тільки перша частина цільової функції (8.6), а друга частина цільової функції (8.6) взагалі виключається з розгляду. Якщо $\alpha_1 = 0$, то картина зворотна. Глибоке знання реальної проблеми, накопичений досвід можуть дозволити ОПР вибрати α_1 та α_2 так, щоб, вирішивши оптимізаційну задачу з єдиною цільовою функцією F , він отримав рішення що задовольняє його для вихідної постановки задачі з двома цільовими функціями.

По суті, зустрівши труднощі при вирішенні двокритеріальної задачі, ми замінили її однокритеріальною, яку вміємо вирішувати. Звичайно у випадку наявності трьох і більше

Таким чином при пошуку оптимального плану при багатокритеріальній оптимізації крім формалізованого алгоритму, фігурують такі поняття, як "досвід", "перевага". Однак це включення "людського фактора", яке на перший погляд здається дивним, тут є цілком доречним і природним.

При використанні багатокритеріальної оптимізації та наявності трьох і більше цільових функцій кількість розрахунків значно зростає. Тому бажаним є проведення розрахунків з використанням комп'ютера. Проте враховуючи потужність сучасних комп'ютерів при розв'язуванні задач багатокритеріальної оптимізації можна використовувати прості методи, які в теорії вважаються мало ефективними, наприклад метод загального пошуку. Цей метод фактично являє собою повний перебір різних варіантів. Наприклад відгук σ_e визначено як головний, а для другого задано певну умову $\delta \geq \delta_{\max}$. Неважко програмними засобами організувати розрахунок значень цільових функцій для σ_e і δ при почерговій зміні значень факторів x_1, x_2, \dots, x_k з заданими кроками по кожному з них. Крок зміни кожного з факторів задається точністю, з якою вони вимірюються в експерименті. Розраховані значення відгуків і задані значення факторів записуються у відповідні масиви для повного циклу розрахунків. Після цього визначається максимальне значення відгуку σ_e , який визначений як головний. Індексу елементу масиву для σ_e , яком це найбільше значення знаходиться, відповідає вже розраховане значення другого відгуку δ і значення факторів, які відповідають максимальному значенню σ_e . Перевіряється додаткова умова для другого відгуку і якщо вона виконується (тобто $\delta \geq \delta_{\max}$), розрахунки закінчують. В разі коли вона не виконується, в чарунку масиву головного відгуку записується нуль або якоесь від'ємне число і знову проводиться пошук найбільшого значення σ_e . Так повторюється до тих пір, поки не буде знайдено максимальне σ_e при $\delta \geq \delta_{\max}$. Якщо такого поєднання факторів не знайдено, то потрібно переглянути додаткову умову у бік її послаблення і повторити розрахунки.

Метод загального пошуку можна дещо модифікувати шляхом більш раціонального вибору кроків розрахунку. Для цього вибирають величини кроків зміни значень факторів в декілька разів більшими ніж потрібна точність. Після серії розрахунків визначається область факторного простору, в якій знаходиться екстремум. Границі цієї області визначають нову зону пошуку екстремуму, якій знову визначаються вже зменшені кроки розрахунків. Так можна повторювати до тих пір, поки не буде досягнуто потрібну точність.

Таким чином за рахунок наявності особи, яка приймає рішення (ОПР), та використання логіко-математичних прийомів з'являється можливість вирішення задачі багатокритеріальної оптимізації, що не має взагалі математичного розв'язку.

Завдання комп'ютерного практикуму

Розробити комп'ютерну програму, що реалізує метод послідовних поступок і загального пошуку. З її допомогою вирішити задачу багатокритеріальної оптимізації.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Визначити кроки зміни факторів для розрахунку значень цільових функцій виходячи з потрібної точності, яка визначається ОПР (в даному випадку студентом).

2. Розробити комп'ютерну програму для проведення розрахунків цільових функцій і реалізації методу загального пошуку. Для цього потрібно виконати:

- а) задати розмірність та описати масиви для відгуків та факторів;
- б) організувати розрахунки цільових функцій при циклічній зміні факторів із заданими кроками та записати результати розрахунків у відповідні масиви;
- в) визначити максимальний елемент масиву, який відповідає головному відгуку, та запам'ятати індекс цього елемента;
- г) перевірити додаткову умову для другого відгуку використовуючи вже розраховані значення та індекс, який запам'ятований. В разі її виконання вивести результати обчислень. Якщо умова не виконується, то записати у комірку масиву головного відгуку з максимальним елементом нуль і повернутися в пункт в).

Необхідні оператори мови QBasic, які необхідні для програмної реалізації цього алгоритму:

CLS – очистка екрану;

DIM – опис розмірності масиву;

FOR ... NEXT – оператор циклу з лічильником;

INPUT – ввід числових даних з клавіатури;

PRINT - вивід інформації на екран;

GOTO (10) – безумовний перехід на позначену мітку;

IF Умова THEN Оператор 1 ELSE Оператор 2 – оператор умови. Якщо “Умова” виконується, то виконується “Оператор 1”, якщо ні, то виконується “Оператор 2”;

SLEEP – тимчасова зупинка виконання програми. Виконання програми продовжується при натисканні будь якої клавіші клавіатури. Використовується для зручності коли потрібно переглянути та оцінити проміжні результати обчислень.

5. Сформулювати висновки по роботі.
6. Оформити комп'ютерний практикум.

Контрольні запитання

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

Література

1. Горстко А.Б. Познакомьтесь с математическим моделированием. - М.: Знание. – 1991. – 157 с.
2. Рейклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике. Том 1.– М.-Мир. – 1986. -349 с.

ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ СИСТЕМ. ІМІТАЦІЙНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ ЧИСТИХ МЕТАЛІВ

Мета роботи: освоєння принципів побудови імітаційних моделей складних систем та опанування методики досліджень з комп'ютерною моделлю кристалізації металів та бінарних сплавів

Теоретичні відомості

Розглядаючи процес формування полікристалічної структури металів при кристалізації можна стверджувати, що математичне формулювання математичної задачі, яка б давала можливість описати процес саме структуроутворення, є неможливим. Якщо в розплаві виникло, наприклад, 100 центрів кристалізації (що не є такою значною кількістю), то зростання кожного із них в рамках класичної задачі Стефана, потрібно описати рівняннями теплопровідності. Також потрібно додати початкову умову, умову на границі всієї системи та умови на границях “рідке – тверде” для всіх зростаючих кристалів. Тобто до кожного з рівнянь. Якщо розглядається кристалізація сплавів, то потрібно ще додати рівняння дифузії знов таки з відповідними початковими та граничними умовами. Математична задача, в цьому випадку, зростає до декілька сот рівнянь у частинних похідних та ще більше додаткових умов. Причому тут не передбачається урахування механічної взаємодії зростаючих кристалів, фільтрації рідкої фази, тобто ефектів, що мають місце на останніх етапах процесу. Можна зробити висновок, що при бажанні таку математичну систему сформулювати можна, але розв'язати її неможливо.

Враховуючи те, що при дослідженні процесу структуроутворення при кристалізації ми маємо справу зі системою, яка характеризується великим числом критеріальних параметрів, а також складністю взаємозв'язків між ними і наявністю нелінійних обмежень, то її потрібно розглядати як складну систему. Складні системи вивчаються в науці, яка має назву “системний аналіз”. В системному аналізі впроваджено порівняно новий метод моделювання, що отримав назву імітаційне моделювання (від англійського “simulation modeling”). Суть засобу імітаційного моделювання, полягає в тому, що процес функціонування складної системи уявляється у вигляді певного алгоритму, який і реалізується на ЕОМ. По результатам реалізації можуть бути зроблені ті чи інші висновки щодо вихідного процесу.

Імітаційна модель принципово відрізняється від математичної. Це можна спостерігати, якщо виділити основні етапи її побудови. На першому етапі формуються основні питання про поведження складної системи, відповіді на які необхідно одержати. Безліч цих питань дозволяє задати безліч параметрів, що характеризують стан системи (так звані вектори стану).

На другому етапі здійснюється декомпозиція системи на більш прості частини - блоки. В один блок об'єднуються "споріднені", тобто перетворені по близьким правилам, компоненти вектору стану і процеси, що їх перетворюють.

Третій етап присвячений формулюванню законів і гіпотез щодо поведження як системи в цілому, так і окремих її частин. При цьому дуже важливо зазначити, що в кожному блоці для їх опису можна використовувати різний математичний апарат (алгебраїчні і диференціальні рівняння, математичне програмування та ін.). Саме блоковий принцип дає можливість при побудові імітаційної моделі встановлювати необхідні пропорції між точністю опису кожного блоку, забезпеченістю його інформацією і необхідністю досягнення мети моделювання.

Важливо зазначити також, що залежно від поставлених перед дослідником завдань вводиться параметр, який називається системний час. Він моделює хід часу в реальній системі, що досліджується.

На четвертому етапі формалізованим чином задаються необхідні феноменологічні властивості системи і окремих її частин. Бувають випадки коли ці властивості взагалі не можуть бути обґрунтовані на сучасному рівні знань. В такому варіанті спираються на інформацію, яка отримана при тривалому спостереженні над системою. (Саме таку ситуацію ми маємо при вивченні процесу кристалізації).

Оскільки здійснення двох останніх з перелічених вище етапів найбільш просто реалізується на ЕОМ, то під імітаційною моделлю системи звичайно розуміють комплекс програм для ЕОМ, описання функціонування окремих блоків системи і правил взаємодії між ними.

При достатньо глибокому знанні поведження реальної системи і правильному поданні феноменологічної інформації імітаційні моделі характеризуються більшою близькістю до реальності, ніж математичні моделі. В чималій мірі така близькість обумовлена тим, що блоковий принцип побудови імітаційної моделі (принцип розщеплення) дає можливість верифікувати кожний блок до його включення в загальну модель, а також тим, що вона може включати залежності більш складного характеру ніж ті, що описують простими математичними співвідношеннями.

Модель кристалізації металів та сплавів, яка дозволяє досліджувати процес утворення структури, використовує методологію імітаційного моделювання. При її створенні розглядається процес кристалізації як деяка система, що характеризується складним поведінням і наявністю великої кількості компонентів, що взаємодіють між собою. Відтворення імітаційною моделлю поведіння цих компонентів і їх взаємного впливу дозволить "подивитись" на систему зсередини, прогнозувати поведіння як окремих її компонентів, так і системи в цілому.

Імітаційні моделі і клітинні автомати, як засіб їх реалізації, сьогодні є одним із найбільш перспективних напрямків в розвитку моделювання різноманітних процесів і систем, бо вони дозволяють в більшій мірі дослідити їх поведінку шляхом широкого використання можливостей числового експерименту і цифрових обчислювальних машин.

При дослідженні процесу кристалізації як в теоретичному плані, так і для розробки різноманітних технологічних заходів, великий науковий і практичний інтерес представляє якраз визначення оптимальних шляхів управління зростанням кристалів. Таку можливість надає моделювання структуроутворення при кристалізації і прогноз властивостей майбутньої відливки. Під засобами управління течією фазового перетворення (тобто кристалізацією) розуміється, в першу чергу, зміна вихідного стану розплаву та зовнішніх умов охолодження. Для цього еволюція клітинного автомату "підпорядкована" класичним тепловим законам.

Для аналізу процесу формування структури металу при кристалізації можна залучити прийоми, які використовуються в синергетики, оскільки в цій науці розглядається утворення структур в складних системах. Одним з основних об'єктів досліджень тут є розподілені активні середовища або однорідні мережі, побудовані з однакових елементів, які локально взаємодіють один з одним. В активних середовищах розглядаються мережі з бістабільних (або тригерних) елементів, які володіють двома стаціонарними станами (наприклад 0 і 1). У кожному з цих станів окремий елемент може перебувати нескінченно довго. Зовнішній вплив може призводити до переходу з одного стану в інший. Між даними варіантом збудливого елемента і розплавом, який кристалізується, можна провести аналогію. Згідно з цією аналогією розплав (або рідкий метал) можна розглядати як активне середовище, що складається з бістабільних елементів, кожен з яких може перебувати або в рідкому, або у твердому стані. Поширення фронту кристалізації візуально дуже схоже на рух хвилі перемикання, яка поширюється в бістабільний клітинному автоматі (рис. 9.1). Крім того, хвиля перемикання в ланцюгу

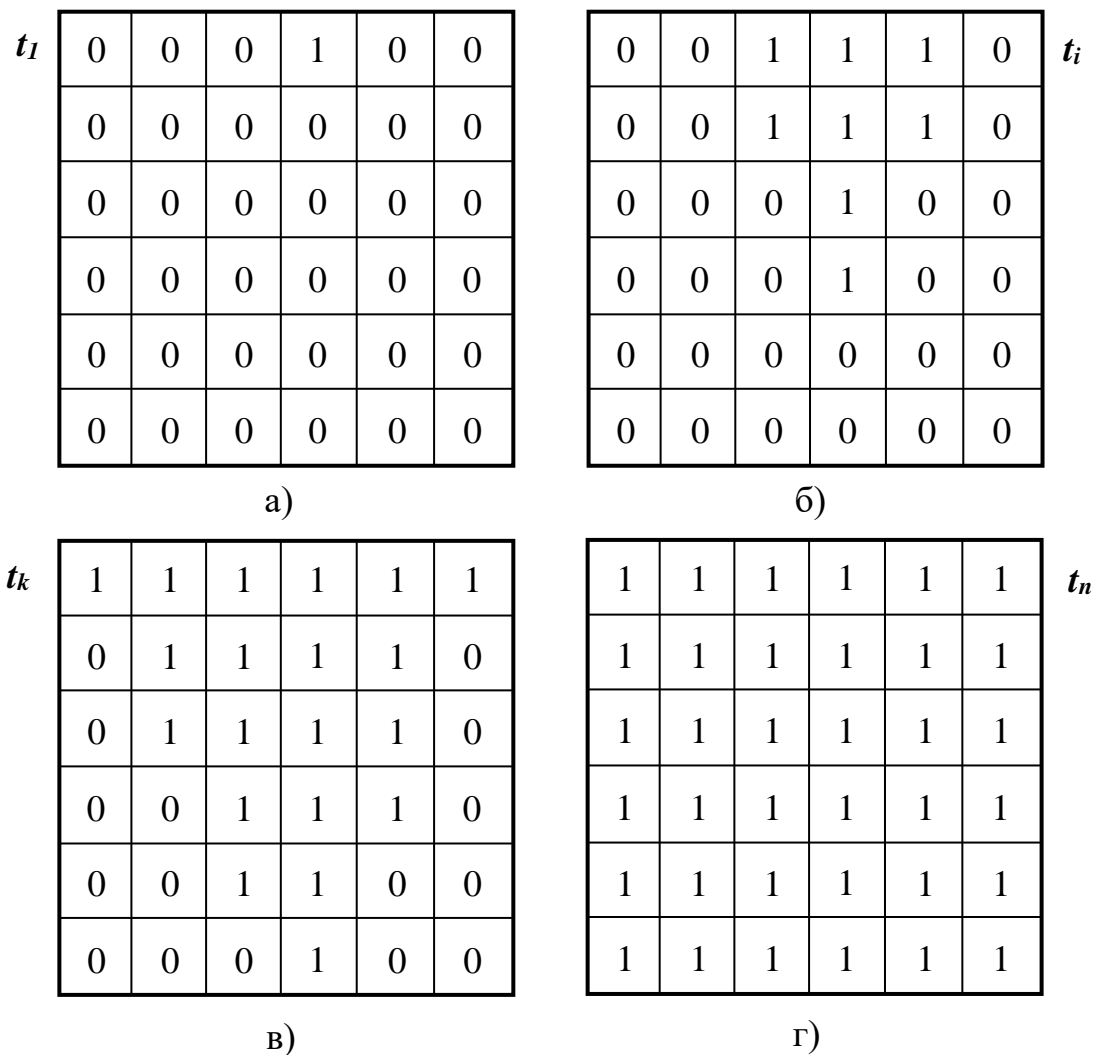


Рис. 9.1 Схема поширення хвилі переключень у двовимірному активному середовищі, що складається з бістабільних елементів: а), б), в), г) – стани кліткового автомата в різні моменти часу t_1, t_i, t_k, t_n

зв'язаних між собою бістабільних елементів кліткового автомата описується рівнянням:

$$\frac{\partial U(r, t)}{\partial t} = a\Delta U(r, t) + F(r, t). \quad (9.1)$$

Але таке ж рівняння лежить в основі багатьох математичних моделей кристалізації і являє собою рівняння теплопровідності, якщо функцію $U(r, t)$ замінити температурою. Коефіцієнт "a" в цьому випадку приймає сенс коефіцієнта температуропровідності, а функція $F(r, t)$ описує виділення теплоти кристалізації.

Розглядаючи кристалізацію чистого металу або бінарного сплаву, при побудові імітаційної моделі можна виділити основні макро фізичні процеси, що визначають її хід. По-перше, це теплопередача, яка відбувається в обсязі розплаву під впливом зовнішніх факторів. Під цим процесом розуміється тепловий потік з поверхні тигля з рідким металом

або розплавом, який спрямований від нагрітого тіла в навколишнє середовище. Саме він зумовлює певну швидкість охолодження в системі і температурний градієнт в ній. Можна говорити, що саме цей процес є визначальним, оскільки одним з найважливіших параметрів при формуванні структури кристалів є температурний градієнт. Тому основним блоком, який задає динаміку роботи моделі, має бути блок визначення температурного поля металу або сплаву (тобто значення температури в довільній точці простору системи в довільний момент часу) протягом всього процесу. У його основу доцільно покласти рівняння теплопровідності Фур'є. При формулюванні граничних умов, незважаючи на відносно високі температури, характерні для промислових розплавів, для спрощення математичного формулювання завдання, радіаційної складової тепловіддачі з поверхні системи можна знехтувати.

Другим найбільш істотним фізичним явищем в даному випадку є дифузійний перерозподіл компонентів розплаву. Тобто зміна концентрації в рідині біля кордону розділу "тверде - рідке" за рахунок різної розчинності другого елемента в рідкому і твердому станах і її подальший перерозподіл в просторі системи.

Кількісні значення зміни концентрації в рідкій фазі при виділенні другого компонента сплаву можна визначити шляхом введення відповідної діаграми стану сплаву з її характеристичними точками. Подальша апроксимація ліній ликвидус і солидус дозволить обчислити необхідні зміни концентрації рідини після локальних фазових перетворень.

Для опису дифузії другого компоненту в рідині зручно використовувати рівняння Фіка. Граничні умови в цьому випадку повинні припускати відсутність обміну речовиною на кордонах системи. Нерівномірність концентрації другого компонента в рідині, яка обумовлена "розділовою дифузисю", враховується зміною початкових умов при кожному новому "тику" системного часу, тобто на кожному дискретному часовому етапі обчислень. Системний час, який є спільним для всіх блоків моделі (алгоритму), синхронізує роботу всього алгоритму і має дискретний характер, тому що розрахунки виконуються на ЕОМ.

Температура і концентрація другого компоненту в кожній точці розплаву в даний момент часу визначають розмір локального переохолодження, яке розраховується як різниця температури в цій точці і температури ликвидус. Як відомо, переохолодження в рідкому стані є основною рушійною силою кристалізації. При його наявності з'являються умови утворення кристала або зростання вже існуючого зародка. Також відомо, що зростання кристала відбувається при менших переохолодженнях, ніж зростання вже існуючого кристала, тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного. Тому вони функціонально розділені. Також враховуючи флуктуаційну природу утворення

зародків і росту кристалів по нормальному механізму, який є характерним для металів, бажано привнести в ці процеси елемент випадку. Тому в управлінні клітинним автоматом використовується генератор випадкових чисел.

Фазовий перехід, якщо він відбувся в певному місці системи, супроводжується виділенням тепла кристалізації і зміною концентрації другого компонента в околиці даної точки, що враховується при розрахунках температури і концентрації на наступному часовому кроці.

У даній моделі обраний імовірнісний тип клітинного автомата для того, щоб модель відображала основні фізичні риси досліджуваної системи. У початковому стані температура рідкого металу або розплаву перевищує температуру кристалізації або температуру ликвидус (далі для спрощення будемо розглядати розплав і, відповідно, говорити про температуру ликвидус). За рахунок тепловіддачі в навколишнє середовище температура системи (розплаву) зменшується і досягає точки ликвидус. Для початку кристалізації має з'явитися переохолодження, яке і з'являється при подальшому охолодженні розплаву. Класична теорія кристалізації розглядає подальший перебіг цього процесу при певному постійному переохолодженні. Але в реальних умовах для більшості технологічних процесів швидкість охолодження значна. І в цьому випадку система знаходиться в нестационарному стані. З одного боку тепло від об'єкта, в якому відбувається кристалізація, продовжує відводитися у навколишнє середовище. А з іншого, починає виділятися прихована теплота кристалізації. Як правило, загальний тепловідвід в навколишнє середовище перевищує тепловий потік, який з'являється за рахунок утворення твердої фази. Тобто переохолодження, як мінімум не зникає, а, швидше за все, збільшується. Формується деяка зона простору, в якій існує переохолодження, величина якого 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 знаходиться у нестійкому стані і будь-яка флуктуація може змінити фазовий стан довільного елемента простору - сформувати початковий кристал (або зародок). При цьому умови його подальшого зростання зберігаються внаслідок існуючого переохолодження, яке також зберігається. Можна говорити про принципову нелінійність даного процесу. Так точка простору, в якій здійснився фазовий перехід, є точкою біфуркації, тобто точкою втрати стійкості, а це явище типово нелінійно.

Інтерфейс програмної реалізації імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації виводить візуальну інформацію про структуру твердої фази; індикацію "тверде - рідке"; індикацію "до евтектичний - за евтектичний" склад сплаву; змодельовану

криву охолодження; змодельований розподіл другого елементу сплаву по перетину системи. В якості вихідних даних також є:

- файли, в які в процесі роботи програми записується температура в центральній точці на кожному кроці розрахунку, кількість центрів кристалізації і лінійна швидкість росту кристала, кількість твердої фази і швидкість її зростання, величина градієнта температур по перетину системи;

- картинка, яка моделюється клітинним автоматом і являє собою вікно виводу в кольоровому або чорно-білому варіанті;

- кількісна оцінка розміру величини зерна;

- наявність переохолодження по площині системи;

- розподіл концентрації другого елементу в твердому сплаві по перетину виливка.

Таким чином, розроблена імітаційна модель дозволяє досліджувати процес кристалізації, формування первинної структури матеріалів при рівноважних і нерівноважних умовах. Вона зручна і наочна.

Завдання комп'ютерного практикуму

Опанувати роботу з імітаційною моделлю кристалізації “KRISTAL” виконавши моделювання процесу кристалізації чистого алюмінію при різних зовнішніх умовах та при відсутності чи наявності сторонніх запалів твердої фази.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Запустити програму “ KRISTAL ” на виконання та провести настройку імітаційної моделі.

2. Ввести у відповідні вікна параметри, що зв'язані із умовами охолодження (рис. 9.2 а):

- початкову температуру та температуру закінчення розрахунків (“Начальная температура” и “Конечная температура”);

- температуру навколишнього середовища ліворуч (“Температура слева”);

- температуру навколишнього середовища праворуч (“Температура справа”);

- температура навколишнього середовища знизу (“Температура снизу”);

- температура навколишнього середовища зверху (“Температура сверху”);

- коефіцієнт тепловіддачі ліворуч (“Коэф. теплоотдачи слева”);

- коефіцієнт тепловіддачі праворуч (“Коэф. теплоотдачи справа”);

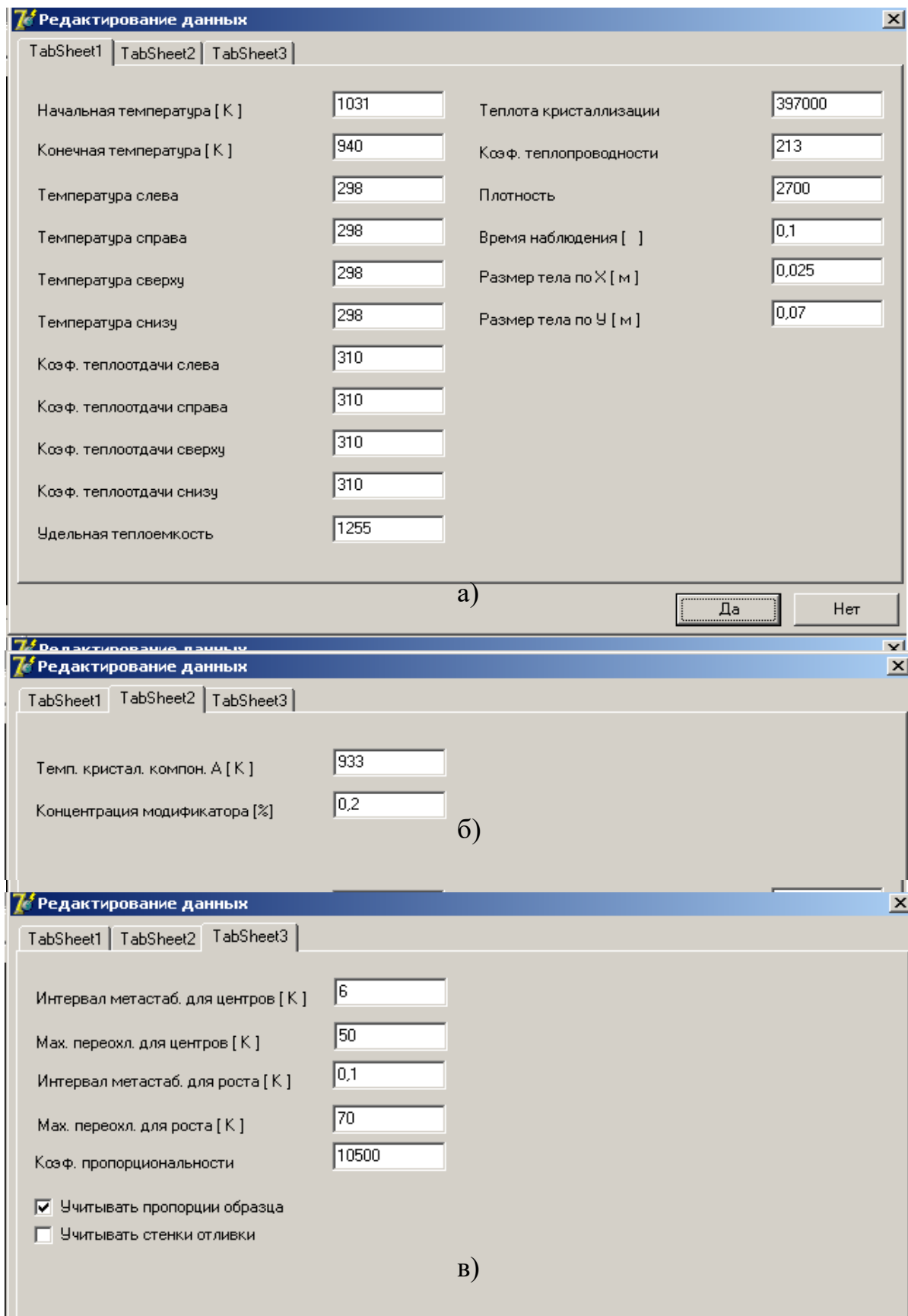


Рис. 9.2 Параметры імітаційної моделі структуроутворення при кристалізації чистого металу (Al):

- а) – які характеризують умови охолодження та властивості металу;
- б) – що зазначає стан рідкого металу;
- в) – евристичні параметри.

- коефіцієнт тепловіддачі знизу (“Коэф. теплоотдачи снизу”);
- коефіцієнт тепловіддачі зверху (“Коэф. теплоотдачи сверху”).

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

3. Ввести у відповідні вікна теплофізичні параметри металу (рис. 9.2 а):

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

При побудові математичної моделі процесу теплопередачі ці параметри вважали сталими, хоча питома теплоємність, коефіцієнт теплопровідності та густина є функціями від температури. Тому в даному випадку в модель вводяться значення, що усереднені по температурному діапазону охолодження.

4. Ввести геометричні розміри системи (“Размер тела по X (м)”, “Размер тела по Y (м)”) та часовий інтервал розрахунків числової схеми задачі теплопровідності (“Время наблюдения”), який є одним “тіком” системного часу всієї імітаційної моделі (рис. 9.2 а).

5. Ввести температура кристалізації чистого металу (“Темп. кристал. компон. А [K]”) та наявність і кількість модифікатора, якщо він є (“Концентрація модифікатора [%]”). Якщо в останій позиції введено “0”, то рідкий метал не модифіковано (рис. 9.2 б). Будь яке інше число показує скільки у відсотковому відношенні твердих частинок знаходиться у рідкому металі у момент початку охолодження. У даному варіанті імітаційної моделі, де змодельовано структуроутворення при кристалізації чистого металу, “малюнок” на екрані комп’ютера складається з 400×400 пікселів (тобто 160000 елементів). Таким чином, у цьому випадку значення кількості модифікатора, наприклад, 0,2% означає, що у площині системи ($X \times Y$) $0,002 \times 160000 = 320$ частинок є твердими.

6. Ввести, так звані, евристичні параметри, які характеризують основні параметри кристалізації: швидкість утворення зародків твердої фази та лінійну швидкість її росту (рис. 9.2 в). Це:

- 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”).

Емпіричний коефіцієнт адаптації використовується для “підстройки” кількості тепла, яке виділяється при кристалізації та компенсації впливу інших наближень.

У цій групі даних є ще дві позиції (рис. 9.2 в): урахування впливу стінок виливниці (“Учитывать стенки отливки”) та урахування геометричних пропорцій вилівка (“Учитывать пропорции образца”). Їх сенс досить простий. Якщо в реальному експерименті стінки виливниці добре пофарбовані, то їхнім впливом на процес утворення зародків можна знехтувати. В протилежному випадку стінки “працюють” як запал. Друга позиція пов’язана з геометрією вилівка. В даній моделі його форма може бути або квадратною, або прямокутною.

7. Дослідити вплив швидкості охолодження на структуру твердої фази, криву охолодження, кількість центрів кристалізації і лінійна швидкість росту кристала, кількість твердої фази і швидкість її зростання.

8. Дослідити вплив кількості модифікатора на структуру твердої фази, криву охолодження, кількість центрів кристалізації і лінійна швидкість росту кристала, кількість твердої фази і швидкість її зростання.

9. Сформулювати висновки по роботі.

10. Оформити комп’ютерний практикум.

Контрольні питання

1. Чому процес 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 протікають при кристалізації металів і сплавів?
5. Що вивчає синергетики?
6. Що являє собою клітковий автомат?
7. Чому в управлінні клітинним автоматом використовується генератор випадкових чисел?
8. Що розуміється під точкою біфуркації?

Література

1. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. М.: Наука. – 1990. - 376 с.
2. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогоев А.А. Синергетика и фракталы в материаловедении / М.: Наука. – 1994. – 384 с.
3. Хэйс Б. Клеточный автомат создает модель мира и мир вокруг себя // В мире науки. - 1984. - N5. - с. 97 - 104.
4. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. - М.: Высшая школа. - 1985. - 271 с.
5. Горстко А.Б. Познакомьтесь с математическим моделированием. - М.: Знание. – 1991. – 157 с.
6. Бялік О.М., Черненко В.С., Писаренко В.М., Москаленко Ю.Н. Металознавство. – Київ. – Політехніка. – 2001. – 374 с.

ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ СИСТЕМ. ІМІТАЦІЙНА МОДЕЛЬ КРИСТАЛІЗАЦІЇ БІНАРНИХ СПЛАВІВ

Мета роботи: дослідження впливу умов кристалізації на формування структури металів та бінарних сплавів при кристалізації в комп'ютерному експерименті

Теоретичні відомості

Алгоритм імітаційної моделі будується за допомогою основних прийомів системного аналізу, тобто шляхом декомпозиції системи, що досліджується, на окремі блоки (підсистеми) і визначення зв'язків між ними. Звичайно, при цьому вводяться деякі фізичні припущення і спрощення, тому що будь-яка модель відбиває основні, істотні ознаки об'єкта, що моделюється.

В загальний алгоритм імітаційної моделі входить математична постановка теплової та дифузійної задач. Розглянемо постановку внутрішньої задачі теплообміну, що виникає при розрахунку охолодження прямокутної проби. Будемо вважати, що тіло є однорідним і воно характеризується постійними у всій розрахунковій області значеннями питомої об'ємної теплоємності $c' = \frac{c}{\rho}$ [Дж·м⁻³·град⁻¹] (тобто відношення питомої теплоємності до густини) і коефіцієнта теплопровідності q [Вт·м⁻¹·град⁻¹].

У основі математичного формулювання задачі, що аналізується, лежить закон зберігання енергії, який виражається рівнянням:

$$c' \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div}(q(x, y, t)) \quad , \quad x, y \in G \quad , \quad (10.1)$$

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

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

$$q(x, y, t) = -\lambda \cdot \operatorname{grad}(T(x, y, t)) \quad , \quad (10.2)$$

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

$$c' \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad}(T(x, y, t))) \quad . \quad (10.3)$$

При постановці крайових умов для рівняння теплопровідності (10.3) потрібно задати розподіл температури в початковий момент часу $T(x, y, 0)$:

$$T(x, y, 0) = T(x, y), \quad x, y \in G \quad (10.4)$$

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

$$q = f(T_w), \quad (10.5)$$

що описується законом Ньютона-Ріхмана. Тобто вважається, що тепловідвід в оточуюче середовище йде виключно за рахунок конвекції.

Розглянемо тепер постановку двовірної задачі теплопровідності, що виникає при розрахунку температури прямокутної заготовки та враховує виділення теплоти при фазових перетвореннях. Вважаємо, що охолодження тіла йде з усіх чотирьох сторін площини, а температурне поле змінюється лише в площині, перпендикулярній осі тіла. Тобто розглядаємо нескінченно тонкий поперечний зріз прямокутного тіла.

Введемо в цій площині систему координат OXY і визначимо через δ_x довжину тіла, а через δ_y - його ширину. Так як теплофізичні характеристики металу, що охолоджується, не залежать від температури, запишемо в області $0 \leq x \leq \delta_x$, $0 \leq y \leq \delta_y$ рівняння теплопровідності (10.3) у такому виді:

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm F(x, y, t), \quad (10.6)$$

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

Фізичний зміст $F(x, y, t)$ досить ясний. Це "імпульс" тепла, який існує один "тік" системного часу в точці або в декількох точках де пройшло фазове перетворення. Тобто загальний вид функції $F(x, y, t)$ весь час змінюється. Знак "+" буде у випадку кристалізації, а "-" у випадку плавлення. Цей додатковий член може мати вид:

$$F(x, y, t) = \frac{L}{c} \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t}, \quad (10.7)$$

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

Граничні умови з усіх сторін є граничними умовами 3-го роду (10.5), що відповідає постійним значенням температури навколишнього середовища $T_0 = const$ і коефіцієнтів тепловідводу з чотирьох боків $\alpha_1 - \alpha_4$:

$$\frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_0], \quad (10.8)$$

$$\frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_0], \quad (10.9)$$

$$\frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_0], \quad (11.10)$$

$$\frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = -\alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_0]. \quad (10.11)$$

Саме для такого виду граничних умов досить просто моделювати різні варіанти охолодження тіла, які трапляються на практиці. Наприклад охолодження розплаву може відбуватися у кокілі чи у піщаній формі, з усіх боків чи з одного або декількох та ін. Достатньо великий набір практично цікавих випадків можна отримати регулюванням коефіцієнтів теплопровідності $\alpha_1 - \alpha_4$.

Припускаючи, що в початковий момент часу тіло є рівномірно прогрітим до температури T_n , запишемо більш детально початкову умову (10.4):

$$T(x, y, 0) = T_0 = const. \quad (10.12)$$

Отже математична постановка задачі для розрахунку температури в довільний момент часу в кожній точці системи (тобто математична модель теплопровідності) складається з виразів (10.6) – (10.12) і разом вони складають задачу (10.13):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \pm \frac{L}{c} \frac{\partial \varepsilon(x, y, t)}{\partial t}, \\ T(x, y, 0) = T_0 = const, \\ \frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} = -\alpha_1 [T(0, y, t) - T_0], \\ \frac{\partial T(\delta_x, y, t)}{\partial x} = -\alpha_2 [T(\delta_x, y, t) - T_0], \\ \frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} = -\alpha_3 [T(x, 0, t) - T_0], \\ \frac{\partial T(x, \delta_y, t)}{\partial y} = -\alpha_4 [T(x, \delta_y, t) - T_0]. \end{array} \right. \quad (10.13)$$

Математичну модель процесу дифузії можна побудувати майже аналогічним образом. Це пояснюється тим, що рівняння теплопровідності Фур'є та рівняння дифузії Фіка розрізняють тільки за назвами процесів, що досліджуються (і, мабуть, швидше по історичному принципу). 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:

$$\frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \quad (10.14)$$

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

Відомо, що коефіцієнт дифузії сильно залежить від температури, змінюючи своє значення на порядки. В свою чергу теплопровідність також залежить від хімічного складу сплаву. Але на даному етапі ефектами взаємовпливу краще знехтувати, що значно спрощує математичне формулювання задачі.

Як і в задачі теплопровідності необхідно задати граничні умови, що визначають поведінку системи на межах розрахункової області. На відміну від температурної задачі, де враховується тепловідвід від поверхні, у дифузійній задачі обміну речовиною на межах області, що досліджується, немає. Тому граничні умови можна записати у наступному вигляді:

$$\frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (10.15)$$

$$\frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad (10.16)$$

$$\frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \quad (10.17)$$

$$\frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \quad (10.18)$$

Початкова умова має на увазі деякий початковий (рівномірний або нерівномірний) розподіл концентрації другого компонента в розплаві:

$$K(x, y, 0) = K_0(x, y). \quad (10.19)$$

Стосовно цієї умови є деякі зауваження. Середню концентрацію по об'єму розплаву з високою точністю можна вважати сталою до початку кристалізації. Тобто, до тих пір, поки не відбудеться фазове перетворення (кристалізація) якогось початкового мікро об'єму, дифузії у рідкій фазі нема. Поява першої кількості твердої фази призводить до виділення або поглинання другого компонента, змінюється концентрація $K_0(x, y)$ і дифузія відбувається у локальних мікро областях рідкої фази. В твердій фазі дифузійний процес практично не відбувається за рахунок значно меншого коефіцієнта дифузії. Взагалі можна підрахувати вирівнювання концентрації по макро зерну, але в даному випадку, враховуючи, швидкості цього процесу в рідкій і в твердій фазі, це не має сенсу.

Таким чином загальна математична постановка задачі для визначення концентрації другого компоненту сплаву об'єднує рівняння (10.14) – (10.19):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial K(x, y, t)}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 K(x, y, t)}{\partial y^2} \right), \\ K(x, y, 0) = K_0(x, y) \\ \frac{\partial K(0, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(\delta_x, y, t)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial K(x, 0, t)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial K(x, \delta_y, t)}{\partial y} = 0. \end{array} \right. \quad (10.20)$$

Добре видно, що задача (10.20) майже подібна до задачі (10.13), і якщо в останній покласти рівними нулю коефіцієнти теплопроводу $\alpha_1 - \alpha_4$, то (10.13) стане аналогічною до (10.20). Ця обставина спрощує практичну реалізацію алгоритму.

Зважаючи на те, що в імітаційній моделі кристалізації передбачене використання кліткового автомата, зручно задачі теплопередачі та дифузії вирішувати чисельно. Враховуючи необхідність вводу системного часу у моделі порядок розрахунків має бути наступним. В першу чергу чисельно розв'язується задача (10.13), в якій крок по часу i задає системний час роботи імітаційної моделі. Один крок системного часу є часом розрахунку дифузійної задачі (10.20), на якому кожен раз змінюється $K_0(x, y)$ в початковій умові відповідно до перетворень в локальних областях та за діаграмою стану бінарного сплаву.

Аналіз літературних даних стосовно діаграм стану подвійних сплавів з евтектикою показує, що в багатьох випадках для приблизного математичного опису відповідних ліній можна використовувати лінійну апроксимацію (рис. 10.1). В даному випадку зручно використати рівняння прямої, яка проходить через дві точки (x_1, y_1) та (x_2, y_2) :

$$\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1}. \quad (10.21)$$

Для ліній ліквідус T_{L1} та T_{L2} рівняння (10.21) можна представити як:

$$T_{L1,2} = T_{кр1,кр2} - (T_{кр1,кр2} - T_e) \frac{C_l}{C_e}, \quad (10.22)$$

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

Концентрацію твердого розчину при температурі $T(t)$ також можна визначити за допомогою рівняння прямої (10.22). Для α -твердого розчину

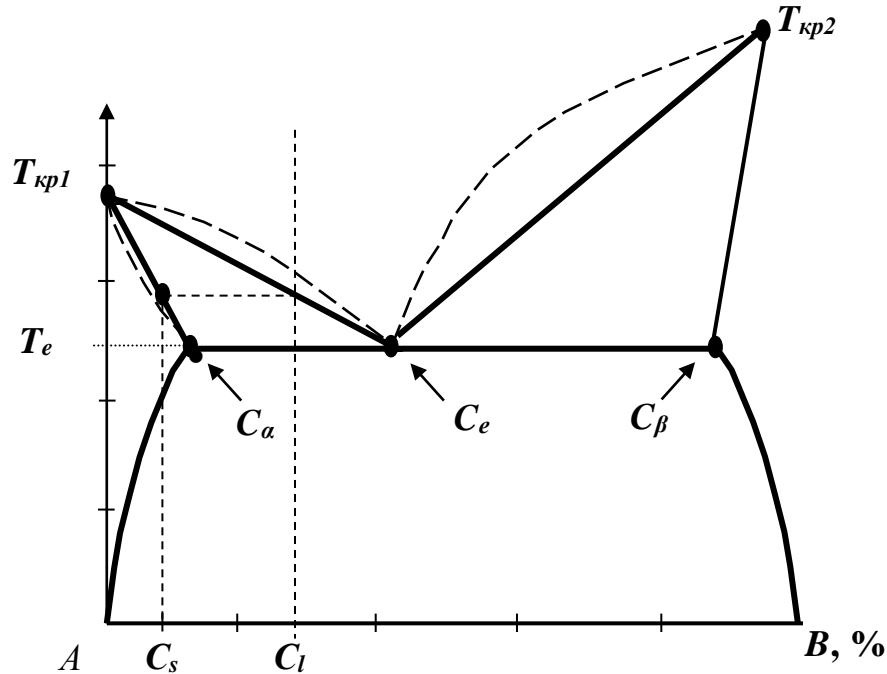


Рис. 10.1 Діаграма стану бінарного сплаву з евтектикою:

$T_{кр1}, T_{кр2}$ – температури початку кристалізації чистих компонентів A і B ;

T_e – температура кристалізації евтектики;

C_α, C_β – максимальні розчинності в α - і β - твердих розчинах, відповідно, компонентів A і B ;

C_e – евтектична концентрація;

C_l – концентрація компонента B в розплаві;

C_s – концентрація компонента B в твердому розчині.

$$C_{s1} = C_\alpha \frac{T_{кр1} - T(t)}{T_{кр1} - T_e}, \quad (10.23)$$

та для β -твердого розчину

$$C_{s2} = C_\beta \frac{T_{кр2} - T(t)}{T_{кр2} - T_e}, \quad (10.24)$$

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 характеристичні точки діаграми стану конкретного подвійного сплаву з евтектикою та знаючи температуру розплаву в даній точці можна розрахувати переохолодження в цій точці, використовуючи рівняння (10.22) - (10.24).

Як показує досвід розрахунків помилками, що дає лінійна апроксимація, як правило, можна знехтувати. При необхідності підвищення точності можна зробити апроксимацію другого порядку. Хоча на прикладі діаграми Al-Si потрібно зауважити, що розбіжності в різних літературних джерелах для неї значні.

Математичні моделі (10.13), (10.20) та (10.22) – (10.24) в якості окремих блоків входять в алгоритм, який являє собою імітаційну модель кристалізації. Зазвичай будь який алгоритм, який призначений для проведення розрахунків починається з вводу початкових даних. В даному випадку потрібно ввести: параметри для теплової та дифузійної задач; характеристичні точки діаграми стану відповідного сплаву; теплофізичні характеристики металу або сплаву; параметри числової схеми; геометричні розміри; наявність і кількість модифікатору (твердих часток) в розплаві; вплив (або його відсутність) стінок форми; різні емпіричні параметри (дивись комп'ютерний практикум № 9). Тому загальна блок-схема (рис. 10.2 а, б) алгоритму імітаційної моделі кристалізації бінарного сплаву, що відбиває фізичні процеси появи і росту кристалів у розплаві під впливом зовнішніх умов, починається з блоку 1 (рис. 10.2 а), в якому здійснюється ввід початкової інформації, до якої відносяться: початкова температура у середині розплаву; температури навколишнього середовища та коефіцієнти тепловіддачі з чотирьох сторін; коефіцієнт дифузії; характерні точки діаграми стану подвійного сплаву з евтектикою (температура кристалізації чистого металу, температура кристалізації евтектики, початкова концентрація сплаву, концентрація евтектики, концентрація максимальної розчинності); теплофізичні характеристики металу (густина, питома теплоємність, питома прихована теплота кристалізації, коефіцієнт теплопровідності); геометричні параметри (довжина та ширина об'єкта, що досліджується); час спостереження; інтервал метастабільності для утворення центрів кристалізації; інтервал метастабільності для швидкості росту кристалів; максимальне переохолодження для утворення центрів кристалізації; максимальне переохолодження для швидкості росту кристалів; емпіричний коефіцієнт адаптації; температура закінчення розрахунків; вміст модифікатора (запального типу) в рідкому металі; вплив стінок виливниці. Розмірність всіх вхідних даних алгоритму імітаційної моделі відповідає системі СІ.

В блоці 2 алгоритму (рис. 10.2 а) починається розрахунок і до початкового часу t_0 додається перший часовий інтервал τ зміщення в системному часі моделі (або перший

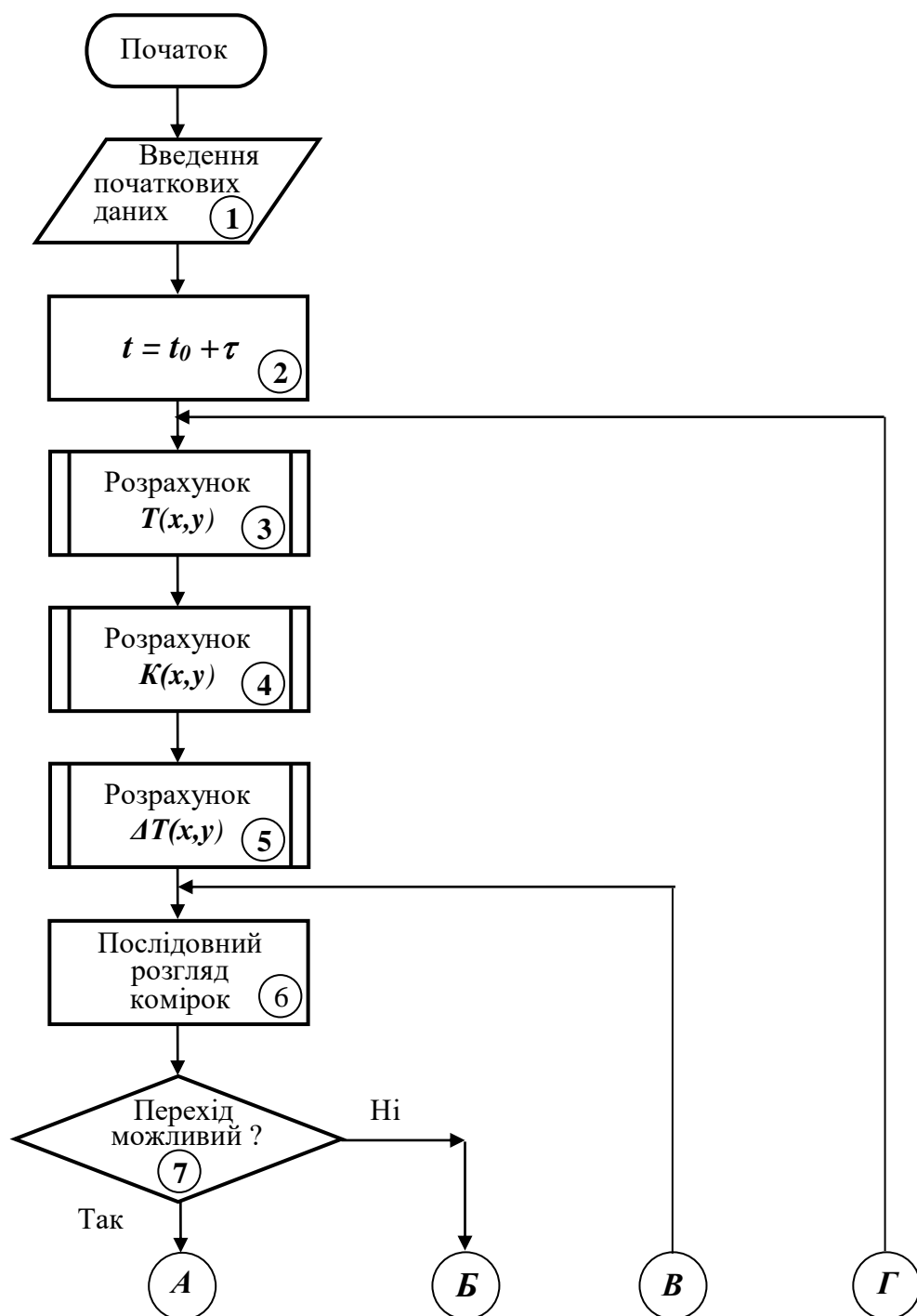


Рис. 10.2. а Блок-схема загального алгоритму імітаційної моделі утворення структури при кристалізації.

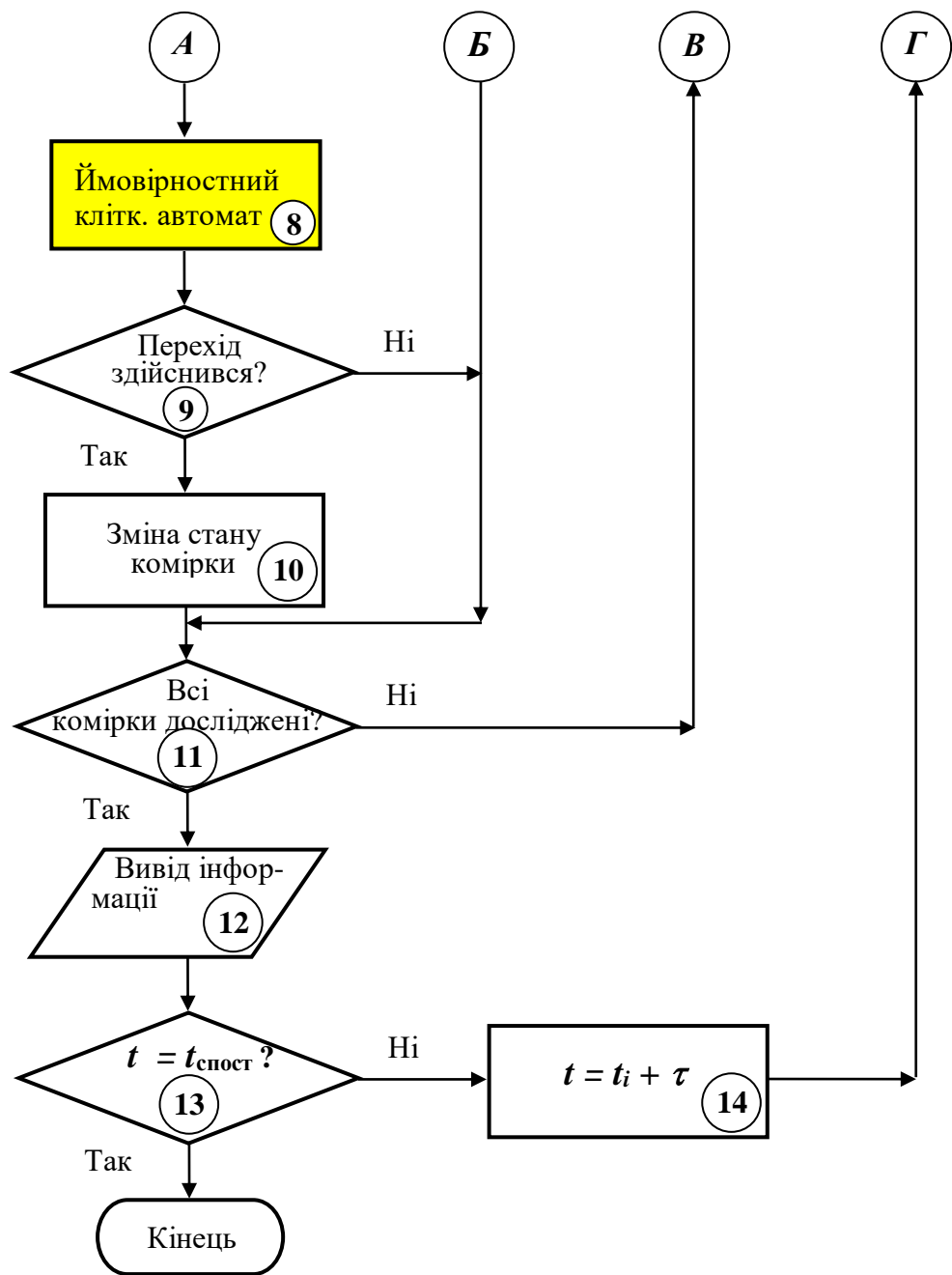


Рис. 10.2. б Блок-схема загального алгоритму імітаційної моделі утворення структури при кристалізації.

“тік” системного часу). Потім послідовно розраховуються температура розплаву $T(x,y)$ (блок 3), концентрація другого компоненту в розплаві $K(x,y)$ (блок 4) та величина переохолодження $\Delta T(x,y)$ (блок 5). Тут у вигляді підпрограм, що являють собою реалізації числових схем, розраховуються математичні задачі (10.13), (10.20) та використовується апроксимація діаграми стану (10.22 – 10.24). Визначивши температуру і концентрацію компоненту сплаву В, можна розрахувати величину переохолодження в даний момент часу у даній точці.

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

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

Більш детально структура блока 8, який реалізує клітковий автомат, представлена на рис. 10.3. Його робота починається з огляду найближчих сусідів чарунки, в якій є переохолодження і можливе фазове перетворення (блок 8-1). Після цього приймається рішення: або з'являється новий центр кристалізації, або зростає вже існуючий кристал (блок 8-2). Зростання кристала відбувається при менших переохолодженнях ніж утворення нового зародка, тобто енергетично ці процеси відрізняються один від одного.

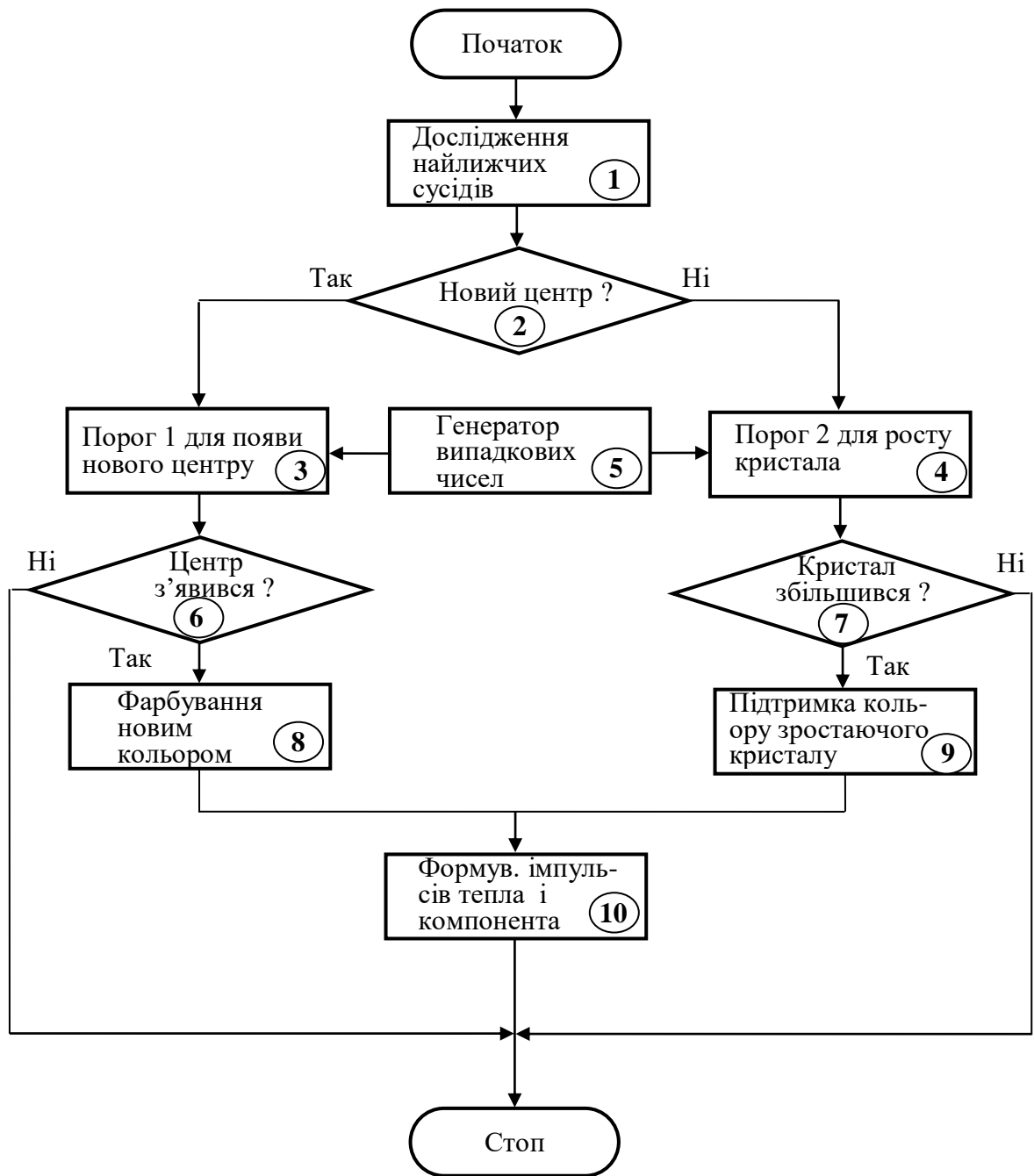


Рис. 10.3. Блок-схема ймовірного кліткового автомата імітаційної моделі кристалізації.

Тому вони розділені. Якщо є хоч один "твердий сусід", то вважається, що можливим є зріст вже утвореного зародка. У протилежному випадку можливо зародження нового центру. Для підкреслення енергетичних розходжень процесів утворення і росту кристала вводяться деякі "бар'єри", розмір яких визначається переохолодженням у даній точці.

Для визначення цих бар'єрів введено поняття максимальних переохолодження для швидкості утворення центрів кристалізації ($n_{ц}$) ΔT_{max2} і для швидкості росту існуючого

кристалу (v_k) ΔT_{max1} . Тоді залежності основних параметрів кристалізації від переохолодження ΔT , які вважаються зростаючою функцією параболічного типу, можна апроксимувати лінійними функціями. При $\Delta T = \Delta T_{m2}$ або $\Delta T = \Delta T_{m1}$ ймовірність появи нового центру кристалізації чи зростання вже існуючого кристалу дорівнює одиниці. При $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \geq \Delta T_{m1}$ ймовірність утворення зародка твердої фази дорівнює нулю, але може зростати вже існуючий кристал. За умови $\Delta T \leq \Delta T_{m2}$ і $\Delta T \leq \Delta T_{m1}$ фазові перетворення не відбуваються. Аналітично ймовірнісні пороги для утворення центрів кристалізації P_2 та для зростання вже існуючого кристала P_1 можна записати наступним чином:

$$P_1 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m1}}, \quad (10.25)$$

$$P_2 = 1 - \frac{\Delta T}{\Delta T_{m2}}. \quad (10.26)$$

В блоках 8-3, 8-4 визначаються ці умовні “пороги” для кожної точки системи, в якій існує переохолодження.

Враховуючи флуктуаційний характер появи зародків та нормального росту металевого кристалу, в моделі враховується “відносне переохолодження” окремо для зародку та швидкості росту, тобто визначається яку частку в даній точці складає переохолодження, яке розраховане за допомогою математичних моделей, до максимально можливого, що задається як евристичний параметр.

Використання генератора випадкових чисел (блок 8-5), що є характерною рисою імітаційної моделі, дозволяє підкреслити флуктуаційний характер процесу. Після розрахунку відповідного бар'єра в блок 8-3 або в блок 8-4 потрапляє випадкове число і якщо воно перевищує цей бар'єр, відбувається фазове перетворення, тобто перехід даної точки зі стану "рідке" у стан "тверде". Для прояву на екрані ЕОМ структури, що формується, передбачається колірна диференціація перетворення, що відбулося. Якщо утворюється новий зародок, він має новий колір (блок 8-8). Зростання існуючого кристала підтримується фарбуванням кольором "твердого сусіда" (блок 8-9).

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

Вихідними даними (блок 12) є:

- файли, в яких в процесі роботи програми записується:

* температура та її похідна в центральній точці на кожному кроці розрахунків для порівняння з реальною кривою охолодження, що потрібно для доведення адекватності моделі та контролю реального експерименту;

* градієнт температур по перетину системи;

* кількість центрів кристалізації, що з'являються при кристалізації;

* швидкість утворення центрів кристалізації в процесі кристалізації;

* кількість твердої фази в процесі кристалізації;

* швидкість зростання кількості твердої фази під час процесу кристалізації;

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

- кількісна оцінка розміру зерна твердого металу.

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

Завдання комп'ютерного практикуму

Опанувати роботу з імітаційною моделлю кристалізації "KRISTAL2" виконавши моделювання процесу кристалізації сплавів Al-Si та Al-Cu при різних зовнішніх умовах та при відсутності чи наявності сторонніх запалів твердої фази.

Порядок виконання комп'ютерного практикуму

1. Запустити програму "KRISTAL2" на виконання та провести настройку імітаційної моделі.

2. Ввести у відповідні вікна параметри, що зв'язані із умовами охолодження, як запропоновано у порядку виконання комп'ютерного практикуму № 9 (пункти 2 – 4, 6 та рис. 9.2 а).

3. Ввести в параметри настройки моделі характерні точки діаграми стану подвійного сплаву з обмеженим твердим розчином та з евтектикою (рис. 10.4):

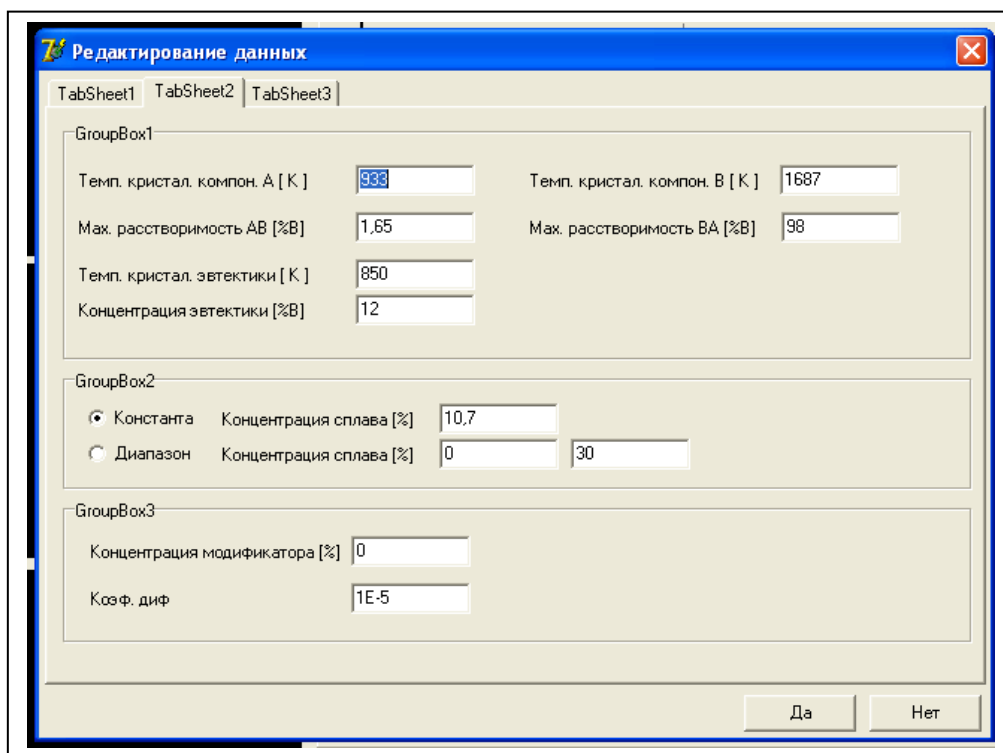


Рис. 10.4 Додаткові параметри імітаційної моделі структуроутворення, які потрібні при моделюванні кристалізації сплавів

- температуру кристалізації основного компоненту сплаву (“Темп. кристал. комп. А [К]”);
- максимальну розчинність компонента “В” в “А” (“Мах. растворимость АВ [%А]”);
- температуру кристалізації евтектики (“Темп. кристал. эвтектики [К]”);
- евтектичну концентрація (“Концентрация эвтектики [%В]”);
- температуру кристалізації компонента “В” (“Темп. кристал. компон. В [К]”);
- максимальну розчинність компонента “А” в “В” (“Мах. растворимость ВА [%В]”);
- початкову концентрацію другого компонента “В”, яка задається у “Диапазон Концентрация сплава [%А]”.

Система $Al - Cu$ має складну діаграму стану, якої показана на рис. 10.5. Протеї можна звести до подвійної діаграми. Точка Q з приблизно 46,5% вмісту в алюмінії міді є точкою утворення хімічної сполуки $CuAl_2$. Якщо обмежитись лише цією частиною діаграми (тобто ввести умову $Cu \leq 46,5\%$), то сплав можна розглядати як бінарний із звичайною діаграмою обмеженої розчинності з евтектикою. Вочевидь в такому випадку потрібно перерахувати процентний склад сплаву. Так 46,5% міді в реальному сплаві будуть відповідати 100% компоненту B еквівалентного сплаву. Значення температур лишаються не змінними. Фактично створюється “еквівалентна” діаграма стану, в якій

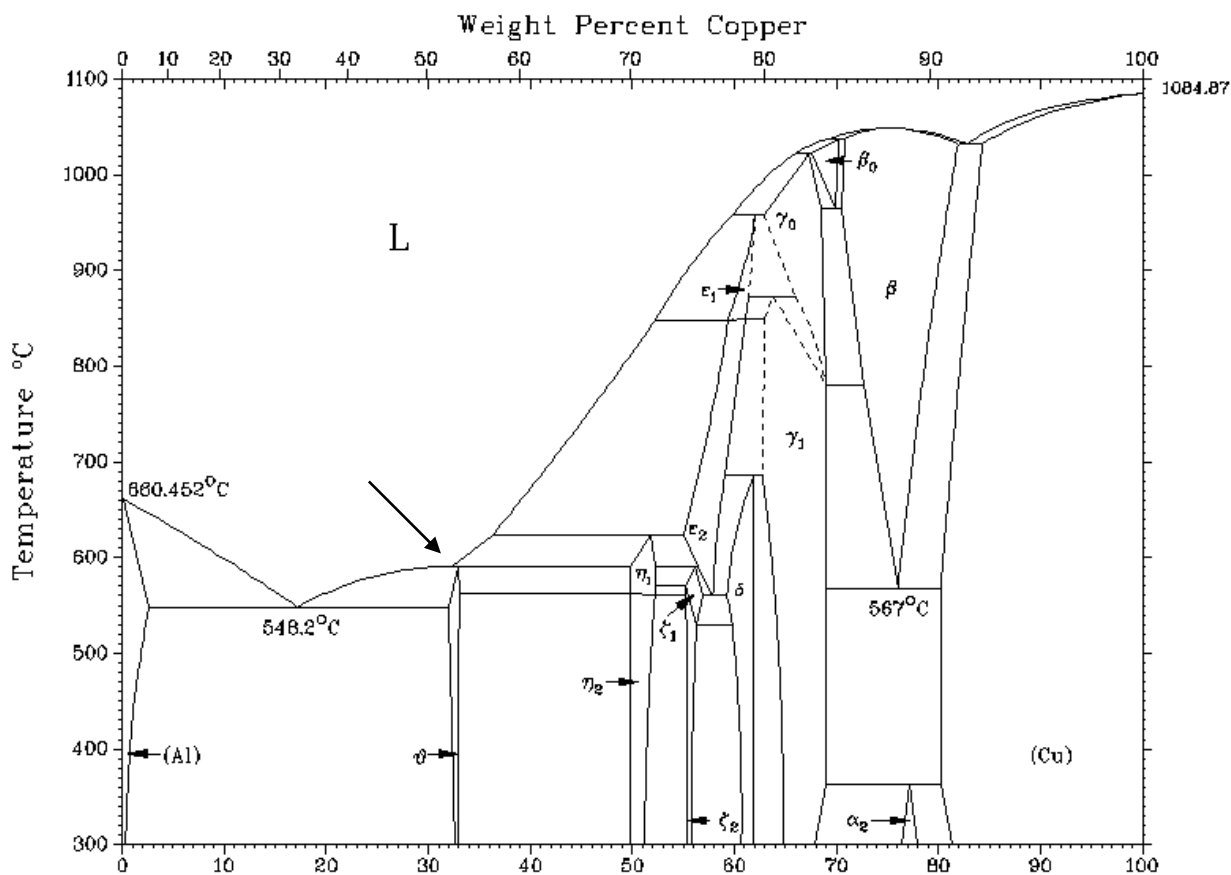


Рис. 10.5 Діаграма стану системи Al – Cu.

реальний сплав, наприклад, Al – 5%Cu має “еквівалентний” склад $\frac{5\% \times 100\%}{46,5\%} = 10,8\%$.

Такий підхід є достатньо логічним і не заперечує основним уявленням про умови переходу із рідкого стану в твердий, але значно розширює можливості моделі.

4. Дослідити вплив швидкості охолодження на структуру твердої фази, криву охолодження, кількість центрів кристалізації і лінійна швидкість росту кристала, кількість твердої фази і швидкість її зростання.

5. Дослідити вплив кількості модифікатора на структуру твердої фази, криву охолодження, кількість центрів кристалізації і лінійна швидкість росту кристала, кількість твердої фази і швидкість її зростання.

6. Сформулювати висновки по роботі.

7. Оформити комп’ютерний практикум.

Контрольні питання

1. Що лежить в основі математичної формулювання задачі теплопровідності ?
2. Які додаткові умови вводять в задачі о теплопровідності матеріалів ?

3. Які додаткові умови вводять в задачі о дифузії ?
4. Який фізичний зміст має нелінійний член $F(r,y,t)$ в рівнянні теплопровідності ?
5. Що вважається “рушійною силою” процесу кристалізації ?
6. Для чого в імітаційну модель кристалізації введено генератор випадкових чисел ?

Література

1. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. М.: Наука. – 1990. - 376 с.
2. Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогоев А.А. Синергетика и фракталы в материаловедении / М.: Наука. – 1994. – 384 с.
3. Хэйс Б. Клеточный автомат создает модель мира и мир вокруг себя // В мире науки. - 1984. - N5. - с. 97 - 104.
4. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. - М.: Высшая школа. - 1985. - 271 с.
5. Горстко А.Б. Познакомьтесь с математическим моделированием. - М.: Знание. – 1991. – 157 с.
6. Бялік О.М., Черненко В.С., Писаренко В.М., Москаленко Ю.Н. Металознавство. – Київ. – Політехніка. – 2001. – 374 с.

ДОДАТКИ

1. ЗНАЧЕННЯ КРИТЕРІЇВ ФІШЕРА

Таблиця Д.1.

Значення F – критерія Фішера при $\alpha^* = 0,05$.

$f_{ад} \rightarrow$									
$f_{в} \downarrow$	1	2	3	4	5	6	12	24	∞
1	164,4	199,5	215,7	224,6	230,2	234,0	244,9	249,0	254,3
2	18,5	19,2	19,2	19,3	19,3	19,3	19,4	19,4	19,5
3	10,1	9,6	9,3	9,1	9,0	8,9	8,7	8,6	8,5
4	7,7	6,9	6,6	6,4	6,3	6,2	5,9	5,8	5,6
5	6,6	5,8	5,4	5,2	5,1	5,0	4,7	4,5	4,4
6	6,0	5,1	4,8	4,5	4,4	4,3	4,0	3,8	3,7
7	5,5	4,7	4,4	4,1	4,0	3,9	3,6	3,4	3,2
8	5,3	4,5	4,1	3,8	3,7	3,6	3,3	3,1	2,9
9	5,1	4,3	3,9	3,6	3,5	3,4	3,1	2,9	2,7
10	5,0	4,1	3,7	3,5	3,3	3,2	2,9	2,7	2,5
11	4,8	4,0	3,6	3,4	3,2	3,1	2,8	2,6	2,4
12	4,8	3,9	3,5	3,3	3,1	3,0	2,7	2,5	2,3
13	4,7	3,8	3,4	3,2	3,0	2,9	2,6	2,4	2,2
14	4,6	3,7	3,3	3,1	3,0	2,9	2,5	2,3	2,1
15	4,5	3,7	3,3	3,1	2,9	2,8	2,5	2,3	2,1
16	4,5	3,6	3,2	3,0	2,9	2,7	2,4	2,2	2,0
17	4,5	3,6	3,2	3,0	2,8	2,7	2,4	2,2	2,0
18	4,5	3,6	3,2	2,9	2,8	2,7	2,3	2,1	1,9
19	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,9
20	4,4	3,5	3,1	2,9	2,7	2,6	2,3	2,1	1,9
22	4,3	3,4	3,1	2,8	2,7	2,6	2,2	2,0	1,8
24	4,3	3,4	3,0	2,8	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
26	4,2	3,4	3,0	2,7	2,6	2,5	2,2	2,0	1,7
28	4,2	3,3	3,0	2,7	2,6	2,4	2,1	1,9	1,7
30	4,2	3,3	2,9	2,7	2,5	2,4	2,1	1,9	1,6
40	4,1	3,2	2,9	2,6	2,5	2,3	2,0	1,8	1,5
60	4,0	3,2	2,8	2,5	2,4	2,3	1,9	1,7	1,4
120	3,9	3,1	2,7	2,5	2,3	2,2	1,8	1,6	1,3
∞	3,8	3,0	2,6	2,4	2,2	2,1	1,8	1,5	1,0

* α – рівень значимості. $\alpha = 1 - P$, де P – довірча ймовірність.

$f_{ад}$ - ступінь волі для дисперсії адекватності; $f_{в}$ - ступінь волі для дисперсії відтворюваності.

2. КРИТИЧНІ ЗНАЧЕННЯ КРИТЕРІЮ КОРЕЛЯЦІЇ

Таблиця Д.2.

Критичні значення коефіцієнта парної кореляції R при $\alpha^* = 0,05$.

Число ступенів волі f	Критичне значення R	Число ступенів волі f	Критичне значення R	Число ступенів волі f	Критичне значення R
1	0,997	9	0,602	17	0,456
2	0,950	10	0,576	18	0,444
3	0,878	11	0,558	19	0,433
4	0,811	12	0,582	20	0,423
5	0,754	13	0,514	21	0,349
6	0,707	14	0,497	22	0,273
7	0,666	15	0,482	23	0,217
8	0,632	16	0,468	24	0,192

* α – рівень значимості. $\alpha = 1 - P$, де P – довірна ймовірність.

$f = N - 1$, де f - ступінь волі; N – кількість експериментальних точок.