

А.Д. Кузик, канд. фіз.-мат. наук, В.М. Юзевич, д-р фіз.-мат. наук

МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК У ПОВЕРХНЕВИХ ШАРАХ ЗМІЦНЮЮЧИХ ПОКРИТТІВ ДЕТАЛЕЙ ПОЖЕЖНИХ АВТОМОБІЛІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ІМОВІРНІСНОГО ПІДХОДУ

Проаналізовано результати використання ймовірнісного підходу для аналізу фізичних характеристик деталей пожежних автомобілів, отриманих на основі комп'ютерного моделювання. Проведена оптимізуюча конкретизація програм, пов'язана з виконанням оптимізуючих перетворень для підвищення якості програм при збереженні мовного рівня їх представлення.

Властивості матеріалів зміцнюючих покриттів деталей пожежних автомобілів, їх хімічний склад, структуру, режими експлуатації потрібно прогнозувати, оскільки автомобілі можуть перебувати в екстремальних ситуаціях. Для цієї мети використовують так звані структурні методи, зокрема, методи мікроскопічного, макроскопічного та рентгенівського аналізу, методи, які базуються на зв'язку між структурою та властивостями матеріалу [1]. Існує тісний взаємозв'язок між властивостями матеріалів та їх внутрішньою будовою. Зокрема, у такому взаємозв'язку важлива роль належить поверхневим ефектам [2].

Оскільки інформація про поверхню деталей машин розгалужена й складна, то відповідні інформаційні потоки постійно нарощуються. Локальні дані, необхідні для детального вивчення фізичних характеристик поверхонь, можуть бути систематизовані й використані для формування потрібної інформації на основі масивів даних [3]. Ці знання важливі для обробки інформації про нові досконаліші зміцнювальні покриття деталей машин, та для формування баз даних. Важливе місце в такого роду дослідженнях належить графічним базам даних про поверхню чистих металів [1].

Теоретичні та практичні аспекти розробки й функціонування графічних баз даних достатньо добре вивчені. Але взаємозв'язок між структурою матеріалу (металу) і обробкою та розпізнаванням зображень, які отримаємо у процесі діагностики поверхневих фаз, недостатньо вивчений. Це тому, що недостатньо детально вивчені особливості взаємодії електричних і механічних полів поблизу поверхні і їх вплив на структуру. Особливості такої взаємодії можна аналізувати на основі графічних даних і обробляти з допомогою комп'ютерних технологій [1].

Розглянемо аналітичну модель для оцінки параметрів поверхневих шарів металів Pd , W , V , Pb , які використовуються для формування зміцнюючих покриттів пожежних автомобілів. Моделювання явищ і процесів реалізуємо у рамках нерівноважної термодинаміки та фізики поверхні [2]. Відповідні математичній моделі зразки металів належать чутливим елементам інформаційно-вимірювальних систем (ІВС), які використовуються для діагностики поверхні металів. Для ефективного функціонування ІВС [4] потрібно знати особливості взаємодії електричного й механічного полів в області такої неоднорідності як поверхневий шар металу, зокрема, під час радіаційного опромінення та температурних змін.

Для обґрунтування методики оцінки поверхневої енергії та її змін під дією радіаційного опромінення для ряду металів розроблено обчислювальну процедуру на основі системи макроскопічних термодинамічних рівнянь [2,4] і мікроскопічного співвідношення типу Борна-Майєра [5].

Розглянемо зразок металу в неактивному неполяризованому газовому середовищі (повітрі). Нехай область $x > 0$ (V_1) займає метал, а $x < 0$ (V_2) – повітря (x, y, z – декартові координати). Основні рівняння моделі такі [2,4]:

$$s_h = \int_0^h s_y \cdot dx, \quad s_y = s_z, \quad (1)$$

$$s_y + p = 0 \quad (p = 100 \text{ МПа} - \text{атмосферний тиск}), \quad (2)$$

$$g = g_1 + \xi g_2, \quad (3)$$

$$\partial g / \partial k = \partial (g_1 + \xi g_2) / \partial k = 0, \quad (4)$$

$$\varphi_g = -F_0, \quad s_x = -(\varepsilon_0/2)(\partial \Psi / \partial x)^2 \quad \text{при} \quad x = 0, \quad (5)$$

$$s_{ij} = E(ne/(1+n) - b\varphi/3)\delta_{ij}/(1-2n) + Ee_{ij}/(1+n) \quad \text{і} \quad \omega_v = \rho\omega = \varepsilon_0 k^2 \varphi + bEe/(3(1+n)) \quad (6)$$

Тут h – ефективна товщина поверхневого шару; b, k, ξ – фізичні характеристики матеріалу; s_{ij}, e_{ij} – компоненти тензорів напружень $\hat{\sigma}$ і деформацій ($i, j = 1, 2, 3$); $s_{11} = s_x; s_{22} = s_y; s_{33} = s_z$; δ_{ij} – символи Кронекера; e – перший інваріант тензора деформацій; ρ – густина матеріалу; ω_v, ω – просторова і масова густини електричного заряду; E, n – пружні постійні (модуль Юнга і коефіцієнт Пуассона); $\varphi = F - F_0$ – відхилення модифікованого потенціалу F електричних зарядів від його рівноважного значення F_0 в об'ємі тіла далеко від поверхні (F прямо пропорційний хімічному потенціалу електронів провідності і обернено пропорційний густині їхніх електричних зарядів); φ_g – граничне значення параметра φ ; Ψ – скалярний потенціал напруженості електричного поля ($\Delta \Psi$ – зміна потенціалу напруженості електричного поля в межах подвійного електричного шару поблизу границі тіла); $g_1 = \int_0^h w_1 dx; g_2 = \int_0^h w_2 dx; w_1 = (\varepsilon_0/2) \cdot (\partial \Psi / \partial x)^2; w_2 = s_x(s_x - 4ns_y)/(2E) + (1-n)(s_y)^2/E; z = \xi g_2/g$ – вміст механічної складової у поверхневій енергії; співвідношення (6) – рівняння стану.

З рівнянь стану (6) і співвідношення (3) випливають означення коефіцієнтів b, k, ξ : $k^2 = (\rho/\varepsilon_0)\partial\omega/\partial\varphi|_{e=\text{const}}$; $b = 3((1+n)/E)\partial\omega/\partial e|_{\varphi=\text{const}}$; $\xi^{-1} = \partial g_2/\partial g|_{g=\text{const}}$. Коефіцієнт ξ – безрозмірний, а розмірності b, k , відповідно, в В^{-1} і м^{-1} . Фізичну величину b називають електрострикційним коефіцієнтом об'ємного розширення, $k = (\rho C_\varphi/\varepsilon_0)^{0,5}$; C_φ – питома електроємність локального елемента тіла ($\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – електрична постійна). Можна вважати, що k^{-1} чисельно рівне віддалі, на якій потенціал електричного поля зменшується в e разів із віддаленням від поверхні електропровідного тіла в його глибину ($e = 2,718$ – основа натуральних логарифмів).

Співвідношення (1)–(4) є системою чотирьох рівнянь для визначення фізичних ξ, b, k і геометричної h характеристик поверхневого шару металів, (5) – граничні умови.

Враховуємо зміщення Z_B подвійного електричного шару на границі тіла [2]

$$Z_B = \frac{3}{4 \cdot k_F} \cdot \left[\frac{\pi}{2} + \left[\frac{E_F}{W_V} - 1 \right] \cdot \arctg \sqrt{\frac{W_V}{E_F} - \sqrt{\frac{E_F}{W_V}}} \right]. \quad (7)$$

Тут W_V – робота виходу електрона з металу; k_F – хвильовий вектор Фермі; E_F – кінетична енергія електрона на рівні Фермі (рівень Фермі); $\pi = 3,14159$.

Для обґрунтування моделі (1)–(6) використаємо також методику [2] мікроскопічного підходу до взаємодії атомів металу з врахуванням радіально-симетричного потенціалу центральних сил (Борна-Майєра) [2]

$$U_{\alpha\beta} = q^2 / R_{\alpha\beta} - C_{\alpha\beta} / (R_{\alpha\beta})^6 - d_{\alpha\beta} / (R_{\alpha\beta})^8 + b_{\alpha\beta} \cdot \exp(-R_{\alpha\beta} / \rho_q), \quad (8)$$

Тут q – електричний заряд частинок; $R_{\alpha\beta}$ – довжина вектора, що з'єднує частинки " α " і " β "; $C_{\alpha\beta}$, $d_{\alpha\beta}$, $b_{\alpha\beta}$ – постійні (фізичні характеристики матеріалу); ρ_q – параметр "жорсткості".

Потенціал $U_{\alpha\beta}$ є сумою кулонівської, вандерваальсівської та відштовхуючої складових. В розрахунках поверхневого натягу і поверхневої енергії ігнорувалась кінетична енергія атомного руху, а потенціальна енергія кристала оцінювалась методами сумування по статичній гратці. Крім того, враховано поправки на неідеальність кристалу, а також поправки для вдосконалення міжіонних парних потенціалів поверхневих областей простих металів.

Механічні параметри стану s_x і s_y у поверхневому шарі тіла знаходимо за допомогою формул (1)–(5), подаючи напруження і деформації у ряди за малим параметром $b_m = bF_0$ аналогічно працям [6,7].

Для вдосконалення процедури проведення числових розрахунків у випадку конкретних задач використано новий для даного класу задач підхід інформаційних технологій – імовірнісний підхід для аналізу числових значень фізичних характеристик (металів), які входять у рівняння стану. Обчислювальний експеримент проведено для паладію, вольфраму, ванадію й свинцю. Відповідні числові розрахунки досить складні та громіздкі. Автоматизацію математичних обчислень реалізовано з допомогою двох програм.

Для комп'ютерних розрахунків алгоритми запрограмовано на основі базових структур керування та елементарних вбудованих типів даних, а також за допомогою механізму створення нових складених структур даних, таких як масиви й структури [8].

Результати обчислювального експерименту стосовно визначення фізичних ξ , b , k , $C_{\alpha\beta}$, $d_{\alpha\beta}$, $b_{\alpha\beta}$, ρ_q і геометричних h , Z_B характеристик поверхневого шару металів (Pd , W , V , Pb) отримані на основі пасивного обчислювального експерименту, що робить досить проблематичним одержання відповідної стійкої імовірнісної моделі, яка би адекватно відображала вказані характеристики.

У працях [9,10] приведено два варіанти алгоритмів, що дозволяють одержати стійку імовірнісну математичну модель для пасивного експерименту. На їх основі для побудови імовірнісної моделі використовуємо багатофакторні степеневі поліноми, які зв'язують функції відгуку (параметри оптимізації, тобто фізичні характеристики матеріалу) із коефіцієнтами поліномів. Визначення чисельного значення коефіцієнтів поліноміальної моделі здійснюється на основі використання матричного рівняння:

$$[K] = [R^*R]^d [R^*] [N]. \quad (9)$$

Тут $[K]$ – вектор коефіцієнтів поліноміальної моделі; $[R]$ – матриця результатів обчислювального експерименту; $[R^*R]^d$ – інформаційна матриця (символ $(^*)$ вказує, що відповідна матриця $[R]$ транспонована); $[N]$ – вектор значень функції відгуку, отриманих на основі експерименту, а також обчислювального експерименту; $[D] = [R^*R]^d$ – дисперсійна матриця.

Алгоритм і програма генерації інформаційної матриці приведені у праці [9], а алгоритм і програма розв'язку одного з варіантів матричного рівняння (8) макромовою MATLAB опісані у [10].

Кількісну оцінку властивостей інформаційної матриці можна одержати за допомогою критеріїв оптимальності. Для рішення поставленої задачі скористаємося двома критеріями оптимальності: D – і G – оптимальності [11,12]. З допомогою критерію D -оптимальності формуємо розрахункову математичну модель, що володіє добрими прогностичними (інтерполяційними) властивостями. На основі критерію G -оптимальності досягаємо найменшої величини максимальної дисперсії оцінки залежної змінної у досліджуваній області факторного простору. Критерії D – і G – оптимальності еквівалентні між собою [13].

Сформульовано описовий алгоритм для забезпечення стійкості математичної моделі (1)–(4), який отримано на основі аналізу даних пасивного експерименту:

1. З отриманого набору даних вибираємо такий спектр точок, що відповідає хоча б наближено умові D-оптимальності.

2. Обчислюємо коефіцієнти апроксимуючого полінома.

3. Перевірку гіпотези про адекватність даної моделі виконуємо шляхом порівняння розрахункових значень параметра оптимізації з контрольними значеннями, включеними у вихідні дані.

4. Уточнюємо критерій оптимальності.

5. Якщо гіпотеза про адекватність отриманої статистичної моделі не виконується, то підраховуємо координати точки, у якій міра точності максимальна. З відкинутих на початковому етапі точок вибираємо таку, координати якої найбільше відповідають критеріальним співвідношенням.

6. Повторюємо дії з кроку 2. Розрахунок зупиняється тоді, коли приймається гіпотеза про адекватність отриманої моделі вихідним даним і не змінюється вигляд моделі при додаванні нових даних, підібраних із допомогою критеріальних співвідношень у вихідний план досліджень.

Для реалізації алгоритму, крім програм обчислювального експерименту для визначення наближень параметрів стану, розроблено дві програми.

Перша програма призначена для генерації матриці повнофакторного експерименту. Друга програма розраховує міри точності коефіцієнтів апроксимуючих поліномів у будь-якій точці факторного простору, згенерованого з допомогою отриманої статистичної моделі.

Розв'язок задачі (11) при $j \rightarrow \infty$ дає стаціонарний розподіл $P(k) = const$, де $const$ визначається з умов нормування і $P(k) = 1/(k+1)$ ($N+1$ – число станів системи, включаючи початковий стан). Отже, при $j \rightarrow \infty$ система з однаковою ймовірністю може опинитися в будь-якому стані з $[0, N]$.

Встановлено, що в результаті процесу довготривалої зміни станів виникає стаціонарний розподіл (P – розподіл [16]), що відповідає однаковій ймовірності знайти будь-який стан системи при $t \rightarrow \infty$. Цей новий розподіл не залежить від початкового, який у випадку двох комірок є біноміальним. Проте у випадку P -розподілу різко зростає ймовірність знайти число параметрів у комірці, що перевищує середнє.

Оцінку адекватності моделі вихідним даним варто здійснювати шляхом порівняння дисперсії відхилення розрахункових значень параметра оптимізації з вихідними значеннями, і дисперсії відхилення розрахованих значень параметра оптимізації із значеннями у точках, що не входять у план експерименту. Оцінку здійснюємо за критерієм Фідера [11,12].

Подальший етап пошуку оптимальних співвідношень між визначальними факторами розв'язується з використанням відомих оптимізаційних алгоритмів (градієнтних чи симплексних [13]) до отриманої моделі у вигляді багатфакторного полінома. Використовуються також оптимізуючі перетворення програм [15].

У процесі обчислювального експерименту при використанні даних пасивного експерименту для формування статистичних моделей, що описують зміну коефіцієнтів моделі (1)-(4) у часі, варто відмовитися від кількісного принципу відбору даних. З наявного набору даних використовувались тільки такі точки, для яких визначник інформаційної матриці, що входить у матричне рівняння (8), буде максимальним. Тільки у цьому випадку розв'язок системи відповідних рівнянь буде стійким. Дані, що залишилися, були використані для перевірки гіпотези про адекватність отриманої статистичної моделі.

Структурні методи дослідження матеріалів і методи мікроскопічного аналізу широко використовуються для вивчення поверхні металів. Перевага цих методів полягає в тому, що між структурою металу і його властивостями існує якісний зв'язок. Це дозволяє методами діагностики вивчати особливості змін механічних, фізичних і хімічних властивостей при відповідних змінах у структурах, виявляти їх причини та знаходити шляхи ефективного покращення структури й властивостей металів.

Об'єктом дослідження в структурних методах є дані комп'ютерної графіки, на яких достатньо добре розпізнаються елементи матеріалу. Інформація про поверхню зразка металу вводиться в комп'ютер у вигляді зображення. Для якісного візуального сприйняття, ефективного розпізнавання й аналізу графічних даних виникає необхідність у проведенні фільтрації і попередньої обробки графічних даних, зашумлених і спотворених технічними засобами отримання зображення.

Використовуючи дані про вплив радіаційного опромінення на відомі фізичні характеристики металів [16–21] з урахуванням відповідних змін модулів Пуассона n і Юнга E , а також значний обсяг числової інформації [22–26] довідникового характеру, на основі обчислювального експерименту розраховано фізичні характеристики ξ , b , k , $C_{\alpha\beta}$, $d_{\alpha\beta}$, $b_{\alpha\beta}$, ρ_q поверхневих шарів для металів (Pd , W , V , Pb). Деякі з характеристик подано у таблиці.

Таблиця 1. Значення фізичних характеристик металів

	g	z	k_1	$\Delta\Psi$, В	ξ	b, 1/B
Pb	0,501	0,842	3,103	2,479	6,321	0,4746
Pd	1,784	0,705	2,199	5,086	20,328	0,238
V	2,104	0,93	1,975	6,693	20,754	0,146
W	2,918	0,758	1,731	7,6	52,782	0,0625

Тут $g_1 = g/g_c$; $g_c = 1$ Дж/м²; $k_1 = k/k_c$; $k_c = 10^{-10}$ м⁻¹;

Застосування частково описаних у статті моделей, методів, методик, алгоритмів і програм дало можливість проаналізувати складні процеси для фізичних характеристик радіаційно опромінених металів. Аналіз статистичних характеристик дисперсійної матриці (визначника, власних чисел, сліду і т.д.) дозволив оптимізувати обчислювальний експеримент (на основі планування вихідної матриці експерименту) так, що відповідна система лінійних рівнянь стала стійкою і похибки шуканих характеристик матеріалів (Pd , W , V , Pb) незначно впливали на оцінки коефіцієнтів апроксимаційного полінома.

Врахування методів і засобів автоматизації математичних обчислень дозволило оптимізувати процедуру обчислень і скоротити час виконання розрахунків оцінки характеристик поверхневих шарів металів майже вдвічі.

У результаті обчислювального експерименту встановлено, що під час опромінення нейтронами до достатньо великих доз фізичні характеристики поверхні металу ξ , b , k і геометричні h , Z_B характеристики поверхневого шару металів можна вважати постійними, якщо температура зовнішнього середовища незмінна.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Деркач Б., Кожан В. Використання графічних даних у матеріалознавстві//Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Комп'ютерна інженерія та інформаційні технології. – 2001. – Вип. 433. – С. 182–187.
2. Юзевич В.Н. Моделирование влияния нейтронного излучения на напряженное состояние поверхностного слоя металла//Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – Москва: Наука, 2000. – № 10. – С. 27-32.
3. Юрчишин В. М. Оцінка якості інформації для опису нафтогазовидобувної предметної області//Методи та прилади контролю якості. – 2000. – № 5. – С. 40–42.
4. Сопрунюк П. М., Юзевич В.М., Підгіряк Я. Є. Корогода І.І. Інформаційно-виміррювальна система контролю поверхневих параметрів твердих тіл//Фізичні методи та засоби контролю середовищ, матеріалів та виробів. – Київ; Львів: Центр "Леотест Медіум", 2001. – Вип. 6. – С. 256–261.
5. Макмиллан Н. Идеальная прочность твердых тел/Атомистика разрушения. Сб. статей. Пер. с англ./Сост. А.Ю. Ишлинский. – М.: Мир, 1987. – С. 35 – 103.

6. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. *Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний*. – М.: Наука, 1974. – 504 с.
7. Митропольский Ю. А. *Метод усреднения в нелинейной механике*. – К.: Наук. думка, 1971. – 440 с.
8. Сопрунюк П.М., Юзевич В.М., Огірко О.І., Луговий П.В. *Автоматизація математичних обчислень для оцінки параметрів поверхневих шарів//Відбір і обробка інформації*. – К.: Наук. думка, 2000. – Випуск 14 (90). – С. 151-155.
9. Цивин М. З. *Формування розширеної матриці при апроксимації даних багатофакторного експерименту //Автомобільні дороги і дорожнє будівництво: Межвед. научн.-техн. сб.: Вин. 58.– 1999. – С. 243 – 249.*
10. Цивин М. З. *Компьютерная реализация алгоритма для обработки данных многофакторного эксперимента // Вестник НТУУ. –Сер.: Машиностроение: Том 1: Вып. 38. – К.: КПИ, 2000. – С. 263 –267.*
11. Налимов В. В. *Теория эксперимента*. – М.: Наука, 1971. – 208с.
12. Монтьомери Д. К. *Планирование эксперимента и анализ данных: Пер. с англ.* – М.: Мир, 1981. – 520 с.
13. Банди Б. *Методы оптимизации: Пер. с англ.* – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.
14. Феллер В. *Введение в теорию вероятностей и ее приложения*. – М.: Мир, 1967. – 498 с.
15. Касьянов В.Н. *Оптимизирующие преобразования программ*. М.: Наука, 1988. 336 с.
16. Дамаск А., Динс Дж. *Точечные дефекты в металлах*.-М. Мир, 1966.-292с.
17. Динс Дж., Виниард Дж. *Радиационные эффекты в твердых телах*.-М.: Изд-во иностр.литература, 1960.-386с.
18. Конобеевский С.Т. *Действие облучения на материалы*.-М.:Атомиздат, 1967.-401с.
19. Томпсон М. *Дефекты и радиационные повреждения в металлах*.-М.: Мир, 1971.-367с.
20. *Точечные дефекты в твердых телах / Под. ред. Б.И.Болтакса, Т.В.Машовец, А.Н.Орлова*.-М.: Мир, 1979.-380с.
21. *Физическое металловедение / Под. Ред. Р.Кана. В 3-х т.*– М.-:Мир, 1968.-Т.3.-484с.
22. Киттель Ч. *Введение в физику твердого тела* – М.: Наука 1978. – 292 с.
23. *Поверхностные свойства твердых тел/Под. ред. М. Грина*. – М.: Мир, 1972. – 432 с.
24. *Таблицы физических величин: Справочник*. – М.: Атомиздат, 1976. – 1006 с.
25. Юзевич В. М. *Критерії міцності твердого тіла з урахуванням розмірного ефекту і впливу середовища//Фізико-хімічна механіка матеріалів*. – 1999. –№ 2. – С.80–85.
26. Eustathopoulos N., Joud J.-C. *Interfacial tension and adsorption of metallic systems//Current Topics in Material Science*. – 1980. – Vol. 4. – P. 281–360.

УДК 614.841

Е.В. Доронин, Е.Ю. Шевченко, Е.Л. Олейник В.Г. Наникашвили

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В ОГНЕЗАЩИТНОМ МАТЕРИАЛЕ НА ОСНОВЕ ОТХОДОВ МУСОРОСЖИГАНИЯ

В данной работе рассмотрен вопрос о распределении температуры в сечении огнезащитного материала. Показана возможность применения материала для защиты металлических конструкций от воздействия высоких температур.

Известно, что основным свойством материалов защиты от воздействия высоких температур на защищенные конструкции является время достижения критических температур, при которых конструкция разрушается.

Для выяснения этого вопроса существуют методики, позволяющие рассчитать распределение температуры по сечению образца в любой момент времени, учитывая, что повышение температуры при пожаре является нестационарным процессом.