Міністерство освіти і науки України

Луцький національний технічний університет

Факультет комп’ютерних та інформаційних технологій

Кафедра автоматизації та комп’ютерно-інтегрованих технологій

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
ЗА СТУПЕНЕМ ВИЩОЇ ОСВІТИ «МАГІСТР»

МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ СТРУКТУР МАТЕРІАЛІВ З ВИКОРИСТАННЯМ КОМП’ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

MODELING OF RANDOM MATERIAL STRUCTURES USING COMPUTER-INTEGRATED TECHNOLOGIES

спеціальність 174 Автоматизація, комп’ютерно-інтегровані технології та робототехніка
(шифр і назва спеціальності)

освітня програма «Автоматизація, комп’ютерно-інтегровані технології»
(назва освітньої програми)

Виконав: здобувач вищої освіти
групи АВм-21
ПРУС Дар’я Василівна

_____
(підпис)

Керівник:
д.т.н., професор
ПОВСТЯНОЙ Олександр Юрійович

_____
(підпис)

Кваліфікаційну роботу
допущено до захисту
«___» _____ 2025 р.
к.т.н., доцент
Гарант освітньої програми:
ГУМЕНЮК Павло Олександрович

_____
(підпис)

Луцьк – 2025 року

ЛУЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет комп'ютерних та інформаційних технологій
Кафедра автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій
Ступінь вищої освіти: *магістр*
Галузь знань: *17 Електроніка, автоматизація та електронні комунікації*
Спеціальність: *174 Автоматизація, комп'ютерно-інтегровані технології та робототехніка*
Освітня програма: *«Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології»*

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри
_____ О. Ю. Повстяной
«___» _____ 2025 р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧА
ДРУГОГО (МАГІСТЕРСЬКОГО) РІВНЯ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Прус Дар'ї Василівни
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема кваліфікаційної роботи: *Моделювання випадкових структур матеріалів з використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій*

Керівник роботи: *д.т.н., професор Повстяной Олександр Юрійович*

затверджені наказом закладу вищої освіти від *«27» червня 2025 року №304/01-02*

2. Строк подання здобувачем вищої освіти кваліфікаційної роботи: *«1» грудня 2025 року*

3. Вихідні дані до роботи: *існуючі моделі випадкових структур матеріалів, модельні уявлення процесів ущільнення порошків у прес-формах*

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити):

1. Огляд літературних джерел за темою дослідження. постановка задачі.

2. Теоретичні та практичні передумови застосування комп'ютерних моделей для розв'язання задач моделювання випадкових структур матеріалів

3. Аналіз структурно-неоднорідних матеріалів.

4. Моделювання випадкових структур матеріалів частинок різної форми.

5. Перелік графічного матеріалу :

графічний матеріал виконано у вигляді презентації, яка складається з 10 слайдів

6. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Розділ 1	*Повстяной О.Ю.*		
Розділ 2	*Повстяной О.Ю.*		
Розділ 3	*Повстяной О.Ю.*		
Розділ 4	*Повстяной О.Ю.*		
Нормоконтроль	*Лапченко Ю. С.*		
Показник запозичень тексту			
Академічна доброчесність	*Федік Л. Ю.*		

7. Дата видачі завдання _____*27.06.2025 р.*_____

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

N з/п	Назва етапів кваліфікаційної роботи магістра	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1	*Аналіз проблеми за темою роботи та постановка задач*	*01.09.2025 р.*	*виконав*
2	*Аналіз і вибір напрямків дослідження*	*10.09.2025 р.*	*виконав*
3	*Теоретичне дослідження та практична реалізація*	*20.09.2025 р.*	*виконав*
4	*Опис засобів розробки об'єкта проєктування*	*01.10.2025 р.*	*виконав*
5	*Загальні висновки та рекомендації*	*20.10.2025 р.*	*виконав*
6	*Оформлення роботи*	*10.11.2025 р.*	*виконав*
7	*Оформлення презентації*	*20.11.2025 р.*	*виконав*
8	*Здача чистового варіанту кваліфкаційної роботи на*	*01.12.2025 р.*	*виконав*
	кафедру		

Здобувач вищої освіти _____ _____*Прус Д.В.*_____
(підпис) (прізвище та ініціали)

Керівник кваліфікаційної роботи _____ _____*Повстяной О.Ю.*_____
(підпис) (прізвище та ініціали)

АНОТАЦІЯ

Прус Д. В. Моделювання випадкових структур матеріалів з використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій. Рукопис.

Кваліфікаційна робота магістра ОП «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» спеціальності 174 Автоматизація, комп'ютерно-інтегровані технології та робототехніка. Луцький національний технічний університет. Луцьк, 2025.

Кваліфікаційна робота магістра складається з вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел, додатків.

Кваліфікаційна робота присвячена моделюванню випадкових структур матеріалів з використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій. Сучасний етап розвитку цивілізації вирізняється потужним впливом комп'ютерних та інформаційних технологій, які охоплюють усі сфери людської діяльності та сприяють активному поширенню інформації у суспільстві. Тому використання передових комп'ютерно-інтегрованих технологій дає можливість перейти від простого спостереження й фіксації фактів щодо структури до прогнозування завдяки скороченню кількості технологічних операцій і автоматизації виробництва. У даній роботі було перевірено та атестоване обладнання і прилади з використанням сучасних методів досліджень, статистичної обробки отриманих результатів моделювання випадкових структур матеріалів.

Ключові слова: комп'ютерно-інтегровані технологї, структура, моделювання, пора, статистична обробка, імітаційна модель.

ANNOTATION

Prus D. V. Modeling of random structures of materials using computer-integrated technologies. Manuscript.

Master's qualification work OP «Automation and computer-integrated technologies» specialty 174 Automation, computer-integrated technologies and robotics. Lutsk National Technical University. Lutsk, 2025.

Master's qualification work consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of sources used, and appendices.

The qualification work focuses on modeling random structures of materials using computer-integrated technologies. The modern stage of civilization development is characterized by the powerful influence of computers and information technologies, which cover all spheres of human activity and contribute to the active dissemination of information in society. Therefore, the use of advanced computer-integrated technologies enables the transition from simple observation and recording of facts about the structure to prediction, facilitated by the reduction of technological operations and automation of production. In this work, equipment and devices were tested and certified using modern research methods, and statistical analysis was performed on the results obtained from modeling random structures of materials.

Keywords: computer-integrated technologies, structure, modeling, time, statistical processing, simulation model.

ЗМІСТ

стор.

ВСТУП …… 8

РОЗДІЛ 1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ ЗА ТЕМОЮ ДОСЛІДЖЕННЯ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ…… 11

1.1 Класифікація структурно-неоднорідних матеріалів…… 11

1.2 Аналіз розвитку і сучасний стан методів моделювання…… 14

1.3 Теоретичні передумови застосування комп'ютерних моделей для розв'язання задач моделювання випадкових структур…… 19

1.4 Постановка завдань по випускній кваліфікаційній роботі магістра …… 20

Висновки по розділу 1…… 21

РОЗДІЛ 2 ТЕОРЕТИЧНІ ТА ПРАКТИЧНІ ПЕРЕДУМОВИ ЗАСТОСУВАННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ СТРУКТУР МАТЕРІАЛІВ……. 23

2.1 Визначення основних параметрів процесу моделювання випадкових структур матеріалів……. 23

2.2 Алгоритмічний опис моделей процесів……. 24

2.3 Моделювання з використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій……. 27

Висновки по розділу 2……... 29

РОЗДІЛ 3 АНАЛІЗ СТРУКТУРНО-НЕОДНОРІДНИХ МАТЕРІАЛІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛЮВАННЯ…….. 31

3.1 Моделювання структури матеріалів…….. 31

3.2 Ймовірнісно-геометрична концепція випадкових структур матеріалів…… 32

3.3 Моделювання заповнення простору структури матеріалу на основі випадкового розподілу…….. 35

Висновки по розділу 3……... 37
РОЗДІЛ 4 МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ СТРУКТУР МАТЕРІАЛІВ ЧАСТИНОК РІЗНОЇ ФОРМИ…….. 39
4.1 Моделювання випадкових структур матеріалів частинок сферичної форми…… 39
4.2 Моделювання випадкових структур матеріалів частинок несферичної форми…… 42
4.3 Функція радіального розподілу статичних сумішей пуасонівського типу…….. 45
Висновки по розділу 4…… 47
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ ТА РЕКОМЕНДАЦІЇ …….. 48
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ ……. 49
ДОДАТКИ ……..... 52

ВСТУП

Актуальність теми. Впровадження комп’ютерно-інтегрованих технологій вимагає глибокого та комплексного вивчення сучасних технологічних процесів. Використання різних матеріалів дозволяє зменшити металомісткість і енерговитратність виробництва, одночасно забезпечуючи покращені характеристики готової продукції. Це сприяє розв’язанню екологічних проблем, впровадженню безвідходних технологій виготовлення виробів широкого призначення, раціональному використанню енергії та ресурсів, а також зменшенню трудових витрат завдяки скороченню технологічних операцій і автоматизації виробничих процесів.

Одним із ключових напрямів є створення матеріалів на основі металів і кераміки. Завдяки своїм структурним властивостям такі матеріали забезпечують необхідний рівень очищення, характеризуються високою міцністю, потребують мінімальних трудових витрат.

Моделювання випадкових структур матеріалів значною мірою залежить від покращення процесів обробки самих матеріалів. До таких процесів належить, зокрема, формування насипки, яке є одним з основних етапів виробництва та визначає розподіл щільності по об’єму виробу, а отже — і ряд ключових властивостей готової продукції.

Проблема дослідження. Відомо, що реальні структурно-неоднорідні матеріали (СНМ) характеризуються різноманітністю форм частинок і широким діапазоном їхніх розмірів. Використання частинок правильної форми дає змогу отримати заготовки з більш однорідним розподілом густини по всьому об’єму. Натомість застосування частинок неправильної форми значно ускладнює процес. Дослідження структурних та фізико-механічних властивостей заготовок, сформованих із таких частинок, у практичних експериментах є складним завданням через велику різноманітність порошків і значні відмінності у формі та розмірах частинок. Саме тому моделювання первинної структури заготовок, утворених із частинок різної форми, за

допомогою комп’ютерного імітаційного моделювання є важливою та актуальною задачею сьогодення при створенні високоякісних виробів.

Мета кваліфікаційної роботи – вдосконалення наявних технологій виготовлення порошкових виробів із підвищеними механічними та функціональними характеристиками на основі моделювання процесів, що відбуваються під час обробки порошкових і гранульованих, а також застосування комп’ютерних імітаційних моделей для оптимізації їх ущільнення за допомогою комп’ютерно-інтегрованих технологій.

Об’єкт дослідження – структурно-неоднорідні матеріали, нестаціонарні процеси насипки-упаковки шихти.

Предмет дослідження – особливості утворення структурно-неоднорідних матеріалів шляхом комп’ютерного моделювання процесу формування їх пористості.

Методи дослідження: дослідження поведінки порошків та заготовок за допомогою імітаційного моделювання з використанням сучасних мов програмування. Верифікація адекватності моделей проведена шляхом порівняння результатів з відомими теоретичними розв’язками й експериментальними даними за допомогою комп’ютерно-інтегрованих технологій.

Задачі дослідження:

1. Дослідити загальні характеристики системи: пористість та її розподіл, середнє координаційне число.

2. Вивчити механічну поведінку елементів середовища: передачу сил через частинки, переміщення часток, умови стабільності дисперсної системи.

3. Проаналізувати структурні елементи, використовуючи модель дискретного середовища для опису матеріалу методами суцільного середовища.

4. Розробити комп’ютерні імітаційні моделі для обчислювальних експериментів та оптимізації технологічних параметрів.

Практична цінність. Реалізовано метод імітаційно-комп’ютерного моделювання формування пористих заготовок з вільною засипкою ущільнення монодисперсних та полідисперсних пористих матеріалів. ЗапропонованІ алгоритми та програмні модулі для застосовування у наукових та технологічних дослідженнях.

Наукова новизна роботи:

1. Запропоновано нові методи та алгоритми комп’ютерного імітаційного моделювання структури матеріалів із використанням нестаціонарних моделей динаміки плоского руху твердих тіл.

2. Застосовано методику дослідження ключових параметрів процесу засипки порошків за допомогою комп’ютерного моделювання структури СНМ із застосуванням металографічного аналізу.

3. Змодельовано нестаціонарні процеси, що виникають під час формування СНМ у прес-формі, а також встановлено закономірності їх впливу на пористість матеріалу.

4. Отримано функціональні залежності властивостей СНМ від параметрів засипки порошків.

Апробація результатів кваліфікаційної роботи магістра: Результати роботи доповідались та обговорювались на XIII Міжнародній науково-практичній інтернет-конференції молодих учених та студентів «Actual problems of automation and control». Опублікована стаття Прус Д. В. Автоматизована система керування технологічним процесом пошиву сорочок. *Actual problems of automation and control:* матеріали XIII Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції молодих учених та студентів. Випуск № 13. Луцьк: ЛНТУ, 2025. С. 20-24.

Особистий внесок магістранта. Основні результати та положення, рекомендації отримані автором самостійно з відповідним консультуванням свого наукового керівника.

РОЗДІЛ 1
ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ ЗА ТЕМОЮ ДОСЛІДЖЕННЯ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

1.1 Класифікація структурно-неоднорідних матеріалів

Зі зростанням розвитку техніки та технологій збільшується потреба в матеріалах з високими експлуатаційними характеристиками для використання в екстремальних умовах. Залежно від конкретних вимог, такі матеріали повинні забезпечувати необхідний рівень очищення та відзначатися високою міцністю за умови застосування енергозберігаючих технологій у їх виробництві, а також гарантувати мінімальні трудові витрати. Це сприяє зменшенню металомісткості та енергоємності при одночасному досягненні високої якості кінцевого продукту. Крім того, важливим є визначення оптимального балансу між ресурсодобувними та переробними галузями [1].

Структурно-неоднорідні матеріали (СНМ) є найбільш поширеними як серед природних, так і серед штучних матеріалів. Вони широко використовуються в промисловості та будівництві. За своєю структурою СНМ надзвичайно різноманітні, їхні властивості безпосередньо залежать від цієї структури. Тому підходи до розробки методів моделювання структури повинні враховувати особливості кожної групи неоднорідних матеріалів. Поділ СНМ на групи та класифікація їхніх властивостей є умовними, і лише за окремими параметрами можна проводити більш чітку класифікацію цих матеріалів.

Дослідження показує, що структурно-неоднорідні матеріали можна просто класифікувати за кількістю компонентів або фаз, що формують матеріал. При цьому передбачається, що кожен компонент відрізняється від інших хоча б однією з ознак – фізичною або статистичною.

Однак такий поділ є досить умовним, оскільки в статистичних сумішах компоненти можна додатково розділити на групи за іншими ознаками. Тому класифікація СНМ завжди визначається конкретними завданнями, які необхідно вирішити для цих матеріалів.

Найпоширеніша класифікація передбачає поділ за:

1. Фізичними властивостями компонентів.

2. Формою частинок.

3. Просторовим розподілом частинок за розмірами.

4. Просторовим розподілом частинок за орієнтацією.

Розподіл компонентів СНМ за розмірами має сенс тільки в тому випадку, якщо вони мають форму. Це або різного типа наповнювачі і заповнювачі, або компоненти композицій без заповнюючого середовища. За розподілом частинок композиції можна ділити на однорідні (монорозмірні) з дискретним розподілом і частинки з безперервним розподілом за розмірами. До першої групи відносяться моно атомарні металеві рідини, до другої – різні шлакові розплави, до третьої – різного роду наповнювачі (технічні ізоляційні матеріали, пластмаси). Тут композиції можна також умовно розділити на статистично ізотропні і статистично анізотропні.

Тут перспективними є методи дослідження властивостей композицій, засновані на математичному моделюванні структури цих матеріалів. З їх допомогою, по-перше можуть бути враховані більш тонкі структурні особливості, які не вдається фіксувати експериментальними методами; по-друге, дослідження проводяться сучасними засобами, а саме за допомогою комп’ютерно-інтегрованих технологій, які дозволяють проводити великі об’єми обчислень з високою точністю і в короткий час [2]. Дослідження методами математичного моделювання структури дозволяють дуже гнучко і оперативно проводити необхідні поправки і уточнення методики дослідження.

В основу будь-якого теоретичного дослідження входить створення математичної моделі явища. У даному випадку виникає необхідність створення математичну моделі структури цих матеріалів, за допомогою якої можна розраховувати і досліджувати фізичні та структурні характеристики.

Для математичного моделювання СНМ і процесів їх обробки, розрахунку різних характеристик доцільно застосовувати комп’ютерно-інтегровані технології.

Математичне моделювання може бути корисним для обґрунтовування форм і розмірів зразків СНМ при експериментальних методах дослідження. Тут можна використовувати органічне поєднання обох методів дослідження, коли протилежні по суті методи не тільки доповнюють один одного, але коли кожний окремо не може дати відповіді на ті або інші питання дослідження. Необхідність такого поєднання вимагає наявності граничного ефекту, що полягає в значній зміні властивостей на межах зразків або виробів з неоднорідних матеріалів (рис. 1.1).

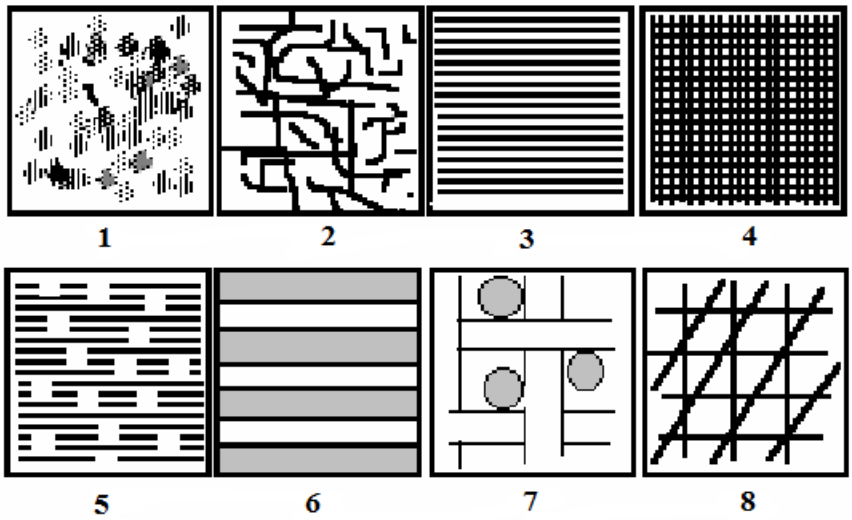

Рисунок 1.1 – Структури СНМ:
1 – хаотичні частинки; 2 – хаотичні волокна; 3 – безперервні (односпрямовані) волокна; 4 – сітки (тканини); 5 – дискретні волокна; 6 – фольга; 7 – ортогональні (безперервні) волокна; 8 – двовимірні волокна [3]

На математичних моделях структури проводять дослідження практично всіх структурних властивостей у взаємозв’язку і з високою достовірністю для будь-яких типів структур. Однією з найважливіших структурних характеристик є функція радіального розподілу і пов’язана з нею функція радіальної густини. Як показує практика обчислень цієї функції, інтервал аргументу її можна обмежити двома-трьома діаметрами частинок композицій, з подальшим збільшенням аргументу ця функція приймає постійне значення

для всіх ізотропних композиційних матеріалів. Тому при виборі розміру представницької комірки слід виходити не стільки з точності обчислень, що проводяться, скільки з необхідності дотримання показності окремих компонентів і фаз композицій.

Система експериментальних досліджень властивостей СНМ, хоча й дозволяє вирішувати низку практичних завдань, у своєму розвитку фактично вичерпала можливості. Тому на перший план виходить необхідність розвитку аналітичних методів, здатних виявляти та досліджувати більш тонкі фізико-структурні властивості структурно-неоднорідних матеріалів із використанням комп’ютерно-інтегрованих технологій.

1.2 Аналіз розвитку і сучасний стан методів моделювання

Запровадження сучасних інформаційних технологій потребує модернізації багатьох традиційних систем, методів опрацювання й аналізу даних, а також створення нових матеріалів. Важливу роль у цьому процесі відіграють комп’ютерно-інформаційні технології. Щоб отримати матеріали з передбачуваними властивостями, необхідно контролювати параметри їхньої структури на всіх етапах виробництва. У цьому контексті особливо перспективними є методи дослідження властивостей композицій, що базуються на математичному та комп’ютерному моделюванні й реалізуються за допомогою сучасних інформаційних технологій. Застосування таких підходів дає змогу [4]:

– враховувати тонкі структурні особливості, які складно зафіксувати експериментальними засобами;

– виконувати масштабні обчислення з високою точністю у стислі терміни;

– отримувати додаткові дані про процеси, що відбуваються під час виготовлення та експлуатації матеріалів, що полегшує контроль і оптимізацію технологічних етапів.

Моделювання структури методами математичного аналізу забезпечує можливість оперативного та гнучкого внесення необхідних коригувань у методику дослідження [5].

Основою будь-якого теоретичного аналізу є побудова математичної моделі явища. У цьому випадку виникає потреба створити математичну модель структури таких матеріалів, яка дозволить розраховувати та прогнозувати їхні фізичні й структурні характеристики.

Детерміновані та стохастичні моделі застосовуються для опису процесів, у яких відсутня значна випадковість. Це означає, що вихідний сигнал як реакція на певний вхідний вплив залишається незмінним у будь-який момент часу, за умови однакових вхідних даних, тобто параметри моделі є сталими. Водночас нестаціонарність таких моделей проявляється в тому, що їх параметри змінюються з часом.

Умови роботи та характеристики стану об’єкта, що підлягає моделюванню, можуть описуватися як випадковими величинами, так і залежностями, які поєднують стохастичні та детерміновані елементи. Важливою особливістю як детермінованих, так і стохастичних моделей є закон, за яким змінюються їх параметри [6].

Моделі з розподіленими параметрами описують системи, для яких характерна просторово протяжна будова об’єктів. Важливою умовою віднесення системи до цього класу є неможливість ігнорувати її просторову протяжність без втрати точності та адекватності моделювання. Стан таких систем визначається функцією або набором функцій, що залежать від кількох змінних. Зазвичай однією зі змінних є час, а іншими — координати точок геометричної області, яку займає система.

Динаміку систем із розподіленими параметрами зазвичай описують диференціальними рівняннями в частинних похідних, а також інтегральними, інтегрально-диференціальними та іншими складними математичними співвідношеннями [7].

Лінійну або нелінійну модель застосовують для визначення відповідно лінійної чи нелінійної залежності між двома змінними: незалежною змінною X та залежною змінною Y, які відображають значення певних характеристик процесів чи явищ. При цьому змінну X називають факторною, а Y – результативною [8].

Дискретно-неперервні моделі – це такі моделі, у яких усі змінні та параметри мають дискретний характер. Вони здатні описувати як дискретні системи, так і неперервні системи, що можуть бути подані у дискретній формі шляхом дискретизації неперервних величин. Такі моделі застосовують у випадках, коли в об’єкті одночасно присутні процеси обох типів.

Експериментування з такими моделями називають імітацією в комп’ютерно-інформаційних системах. Воно здійснюється за допомогою набору відповідних програм, що відтворюють процес функціонування системи або окремих її частин і елементів. Основна ідея таких моделей полягає у створенні алгоритмів і програм, які відображають поведінку системи, її властивості, характеристики та зміни параметрів.

Можливості цього типу моделей є досить широкими: за потреби вони дають змогу досліджувати системи будь-якої складності та призначення з будь-яким рівнем деталізації. Єдиними обмеженнями виступають обчислювальні ресурси комп’ютерно-інформаційних засобів та трудомісткість розроблення складного програмного комплексу.

Імітаційні моделі становлять окремий напрям математичного моделювання. Існує група об’єктів, для яких аналітичні моделі або ще не створені, або для них не існує методів розв’язання відповідних задач. У таких випадках аналітичну модель замінюють імітатором чи іншим типом моделі [9].

Побудову математичної моделі можна умовно розбити на 4 етапи. Перший етап полягає у формулюванні законів, що встановлюють взаємозв’язки між об’єктами моделі. На цьому етапі визначаються елементи моделі та збираються фактичні дані про матеріали чи явища, які досліджуються, що дає змогу виявити їхні взаємозв’язки.

Завершальним результатом цього етапу є подання сформульованих якісних уявлень про зв’язки між об’єктами моделі у математичній формі та визначення відповідних граничних умов.

Оскільки визначення об’єктів моделі та їх взаємодій становить основу гіпотетичної моделі, можна сказати, що на етапі змістовного опису формуються її аксіоми та створюється структура моделі. Остаточний варіант може бути представлений як у вигляді описово-аналітичного формулювання (через опис зв’язків), так і у графічній формі [10].

Другий етап — це етап формалізації, зміст якого полягає у встановленні математичних співвідношень, що описують реальний об’єкт відповідно до мети моделювання та аксіом моделі. Такі співвідношення формуються на основі матеріальних і енергетичних балансів, а також закономірностей фізичних процесів. На цьому етапі визначається форма подання математичної моделі та проводиться аналіз математичних задач, що з неї випливають.

Головною з них є розв’язання прямої задачі – отримання вихідних даних шляхом аналізу моделі (у вигляді теоретичних висновків) для подальшого порівняння їх з експериментальними результатами. На цьому етапі ключову роль відіграє математичний апарат, необхідний для аналізу моделі, а також обчислювальна техніка, яка забезпечує отримання кількісної інформації при розв’язанні складних математичних задач.

Часто математичні задачі, що виникають на основі різних моделей, мають подібну структуру. Це дозволяє розглядати такі типові задачі як самостійний об’єкт дослідження, незалежно від специфічних результатів, що вивчаються [11].

Третій етап передбачає перевірку того, чи відповідає обрана (гіпотетична) модель практичним критеріям і чи узгоджуються отримані під час спостережень результати з теоретичними висновками моделі в межах точності цих спостережень. Якщо модель повністю визначена, тобто всі її параметри задані, то порівняння теоретичних результатів із фактичними спостереженнями дає розв’язання прямої задачі та дає змогу оцінити величину

відхилень. Якщо ці відхилення перевищують допустимі межі точності, модель вважається неприйнятною та потребує уточнення.

Доволі часто при створенні моделі деякі її параметри залишаються невизначеними. Якщо ж математична модель виявляється такою, що за жодного можливого набору параметрів неможливо забезпечити відповідність спостережуваним результатам, то така модель визнається непридатною для дослідження відповідних явищ.

Четвертий етап полягає у подальшому аналізі моделі під час накопичення нових даних про досліджувані матеріали чи явища, а також у її модернізації. У міру розвитку науки й техніки інформація про реальні процеси уточнюється та розширюється, і на певному етапі виникає потреба вдосконалювати сучасні інформаційні технології, оновлювати традиційні системи обробки й аналізу даних [12].

Блок-схема побудови математичної моделі приведена на рис. 1.2.

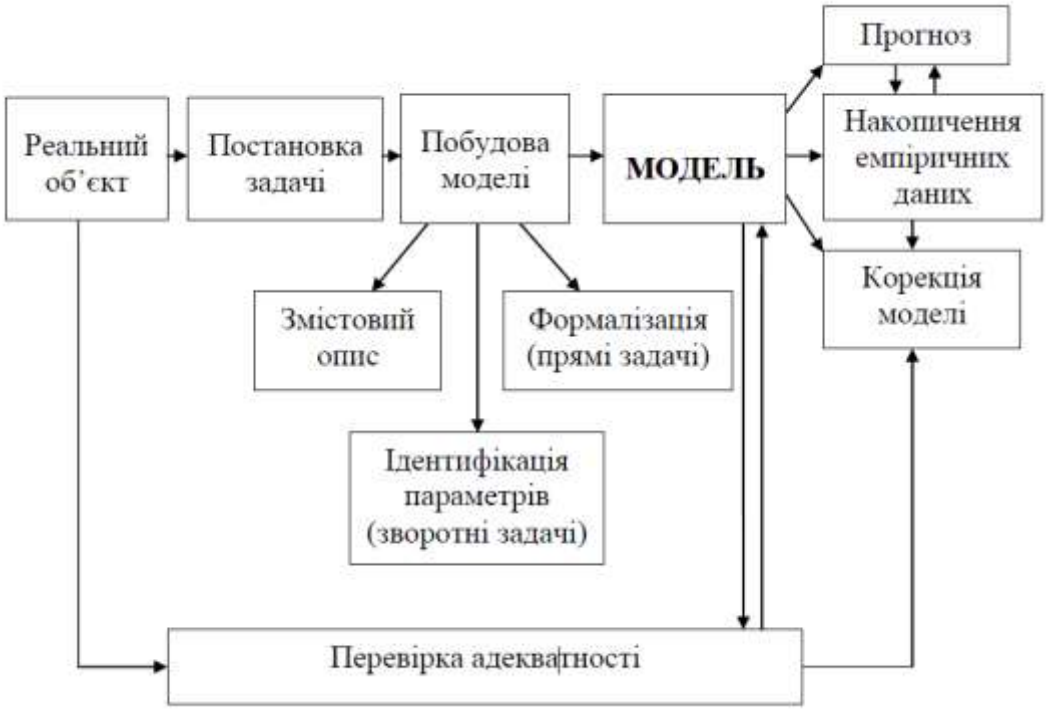

Рисунок 1.2 – Блок-схема побудови математичної моделі [4]

1.3 Теоретичні передумови застосування комп'ютерних моделей для розв'язання задач моделювання випадкових структур

Проблема дослідження СНМ має важливе значення як в наукових цілях, так і в практичному їх використанні. Створення нових матеріалів з наперед заданими властивостями висуває нові вимоги до досліджень, що вимагають невідкладних і ефективних рішень.

Вивченню основних закономірностей процесу пресування присвячена велика кількість робіт.

В основному вони виконувалися у трьох напрямах:

– розробка теоретичних основ процесу пресування;

– створення та дослідження нових технологічних процесів;

– удосконалення традиційних методів пресування за рахунок створення нового обладнання та інструменту.

Однією з основних вимог до виробів є рівномірний розподіл щільності по об'єму пресовки. Визначний вплив на розподіл щільності має засипка порошку в пресову оснастку, яка є першою стадією будь-якого технологічного процесу виготовлення виробу. Дослідження пористості упаковок порошків у широкому діапазоні зміни вихідних параметрів за допомогою натурного експерименту досить складно.

Процес засипки порошку у форму залежить від гранулометричного складу шихти, від фізико-механічних характеристик порошків, способу заповнення форми, габаритів виробу та інших факторів [13]. Результати натурних експериментів з дослідження процесів засипки враховуються при розробці окремих технологічних інструкцій. Це поширене впровадження стримується високою вартістю фізичного експерименту та консервативним відношенням практикуючих технологів до цієї початкової операції.

Процес формування структури дискретного середовища викликає постійний інтерес і останнім часом він успішно розв'язується методами

математичного та комп’ютерного моделювання зі застосуванням комп’ютерно-інтегрованих технологій.

При математичному представленні дискретне середовище приймають у першому випадку у вигляді континуума, у другому – у вигляді куль, окремих фізичних тіл та часток, що контактують по окремих поверхнях. Основним параметром у цьому випадку приймається координаційне число в дисперсній системі, тобто кількість контактів часток. Цей параметр дозволяє оцінити якість структури дисперсних матеріалів і служить опорною точкою при побудові апроксимаційних залежностей фізичних характеристик від пористості.

Аналіз сучасного стану модельних досліджень вказує на чітку тенденцію в описі властивостей матеріалів і фізичних процесів у них на базі моделей випадкової упаковки часток [14]. Наприклад, дослідження процесів ущільнення порошків на різних стадіях пресування, моделювання морфологічних і фізико-механічних властивостей спечених матеріалів, аналіз впливу зміни координаційного числа на процес ущільнення порошку при спіканні і пресуванні, дослідження морфологічних властивостей випадкових упаковок ідентичних часток методом твердих сфер.

Для того, щоб ввести до розгляду параметри, що регулюють середню щільність випадкової щільної упаковки, створено алгоритм комп’ютерного моделювання щільної упаковки рівних по діаметру дисківякий включає параметр, що регулює середню щільність упаковки – число обертів одного диску до його фіксації у структурі.

1.4 Постановка завдань по випускній кваліфікаційній роботі магістр

Мета кваліфікаційної роботи є вдосконалення наявних технологій виготовлення порошкових виробів із підвищеними механічними та функціональними характеристиками на основі моделювання процесів, що відбуваються під час обробки порошкових і гранульованих, а також

застосування комп’ютерних імітаційних моделей для оптимізації їх ущільнення за допомогою комп’ютерно-інтегрованих технологій.

Задля реалізації поставленої мети необхідно провести наступні завдання:

1. Дослідити загальні характеристики системи: пористість та її розподіл, середнє координаційне число.

2. Вивчити механічну поведінку елементів середовища: передачу сил через частинки, переміщення часток, умови стабільності дисперсної системи.

3. Проаналізувати структурні елементи, використовуючи модель дискретного середовища для опису матеріалу методами суцільного середовища.

4. Розробити комп’ютерні імітаційні моделі для обчислювальних експериментів та оптимізації технологічних параметрів.

Висновки по розділу 1

Для вдосконалення наявних та створення нових безвідходних і матеріалоощадних технологій, що забезпечують виготовлення майбутніх деталей без припуску або з мінімальним його значенням та дозволяють постачати промисловість конструкційними, фрикційними та антифрикційними матеріалами, а також дають змогу створювати матеріали з компонентів, доцільно застосовувати методи моделювання випадкових структур матеріалів.

Моделювання випадкових структур матеріалів з використанням комп’ютерно-інтегрованих технологій відкриває широкі можливості для ефективного використання комп’ютерно-інформаційних технологій з метою розв’язання структурно-імітаційних задач за такими напрямами:

а) прогнозування закономірностей формування структури та властивостей матеріалів з урахуванням розмірів структурних елементів шихти;

б) визначення кореляцій між складом, будовою та експлуатаційними властивостями матеріалів;

в) моделювання процесів руйнування у поліедричних структурах із заданими фізико-механічними параметрами та інше.

Для розв’язання таких завдань необхідно мати чітке розуміння фізичних, хімічних та геометричних особливостей процесу формування та моделювання струкутри неоднорідних матеріалів. Особливу увагу при цьому слід приділяти визначенню розподілу пористості, оцінці впливу розмірів і форми частинок на пористість, а також вивченню процесів, що супроводжують формування структурно-неоднорідних матеріалів.

РОЗДІЛ 2
ТЕОРЕТИЧНІ ТА ПРАКТИЧНІ ПЕРЕДУМОВИ ЗАСТОСУВАННЯ КОМП'ЮТЕРНИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ СТРУКТУР МАТЕРІАЛІВ

2.1 Визначення основних параметрів процесу моделювання випадкових структур матеріалів

У математичних моделях дискретне середовище в одному випадку розглядають як континуум, а в іншому – як систему куль, окремих тіл або частинок, що стикаються між собою на визначених поверхнях [15]. Основним параметром для такого підходу є координаційне число дисперсної системи, тобто середня кількість контактів частинки з сусідніми. Цей показник дає змогу оцінити якість структури неоднорідних матеріалів і виступає базовою величиною для побудови залежностей, що описують апроксимаційні фізичні характеристики від пористості.

Проблеми такого типу досліджують, використовуючи тривимірну модель порової структури у вигляді системи щільно впакованих сфер однакового діаметра, а також вивчаючи середнє та критичне координаційне число дисперсних систем, а також однофазні та міжфазні контакти, що формуються в двофазних монодисперсних сумішах і не залежать від об'ємної концентрації компонентів [16].

Дана запропонована методика розрахунку структурних параметрів дає змогу аналізувати основні структурні (кластерні) ефекти, що проявляються під час технологічних процесів виготовлення виробів із порошкових матеріалів.

Відомості про закономірності зміни морфологічних характеристик системи, утвореної в результаті утрушування вільно насипаних ізометричних частинок, містяться передусім у функціональній залежності середнього координаційного числа <X> від середньої відносної щільності <ρ>.

В даному випадку розглядається процес заповнення прес-форм частинками правильної форми – тобто елементами однакового розміру, які

впорядковано розташовані в просторі та водночас мають статистичний характер розподілу. Частинки великого розміру в такій упорядкованій структурі можуть містити дрібніші частиночки, що призводить до значної локальної неоднорідності реальних матеріалів. Саме цю неоднорідність необхідно враховувати та вміти контролювати.

Запропонована методика становить інтерес не лише з теоретичного погляду, а й має практичне значення, зокрема під час оптимізації технологічних процесів виготовлення різних матеріалів із наперед визначеними властивостями.

2.2 Алгоритмічний опис моделей процесів

При детальному розгляді структурно-неоднорідних матеріалів утворення їх структури замінюється моделюванням процесу випадкового заповнення об’єму геометричними елементами з розподіленими розмірами, формами і орієнтацією, причому кожний елемент або кожна група їх описується поряд фізичних параметрів матеріалу, а процес моделювання переноситься до відповідних алгоритмів.

При моделюванні процесу заповнення розглядаються наступні задачі:

а) дослідження взаємозв’язків мікроскопічних структурних і фізичних властивостей композицій із структурою матеріалу;

б) вивчення процесу формування структури із заданими геометричними властивостями;

в) дослідження можливостей управління процесами формування структури з метою отримання матеріалів з необхідними оптимальними властивостями.

Свій початковий розвиток теорія випадкового заповнення отримала в задачах побудови моделі і дослідження структурних властивостей моноатомарних рідин. Елементи такої композиції приймалися сферичними за формою рівних розмірів. Структура композиції в цій моделі представлялася у

вигляді самої вірогідність-геометричної побудови при заданому розподілі частинок в просторі [7].

Приблизно по такій же схемі проводилися аналітичні дослідження побудови композицій з розподіленими за розмірами сферами з урахуванням максимальної густини заповнення. Дослідження проводилися в двох системах побудови упаковок, причому в одній з них передбачалася найщільніша упаковка сфер рівних і найбільших розмірів. У такий спосіб густина заповнення може бути максимально наближений до одиниці. Слід врахувати, що отримання формул для ряду розмірів сфер такої упаковки скрутно, знайдено лише чотири розміри якнайменших сфер для випадку найщільніших упаковок з густиною заповнення до 0,985 (рис. 2.1).

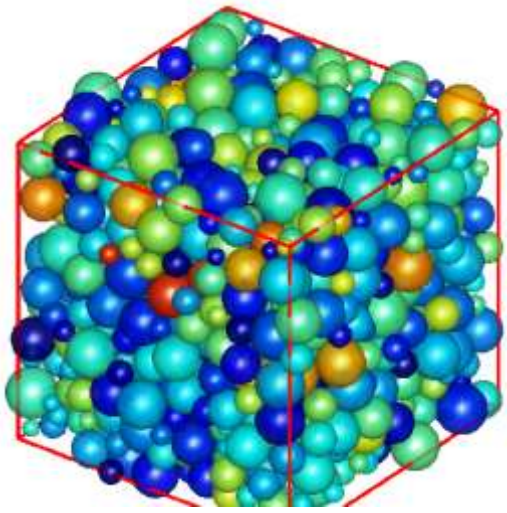

Рисунок 2.1 – Модель випадкової пористості, яка згенерована в Abaqus з використанням Python [1]

Жвавий інтерес представляє оцінка максимальної густини заповнення, що досягається при використовуванні пуасонівського принципу заповнення. Це можна отримати на прикладі заповнення заданого об'єму тілами сферичної форми у 5-мірному просторі, де положення кожної сфери визначається координатами її центру.

Чергова спроба упакувати сферу у момент часу t^0 радіусом $R(t^0)$ завершиться, якщо в області виконається умова (2.1):

$$\sum_{i=1}^{s}[x_i(t)-x_i(t^0)]^2 \geq [R(t)-R(t^0)]^2, 0 \leq t \leq t^0 \quad , \qquad (2.1)$$

де x_i — координати пакованої і упакованих сфер.

Кожну спробу упакувати чергову сферу продовжуватимемо до тих пір, поки вона не задовольнить умові (2.1). Невиконання умови (2.1) означає, що між упакованими сферами не повинне бути точок, в які можна було б помістити чергову сферу без перетину з раніше упакованими частинами.

Якщо процес заповнення упорядкувати таким чином, що спочатку упаковуються сфери з найбільшим радіусом, потім радіус сфер монотонно убуває, то кожному моменту часу відповідатиме своє значення радіусу R, упаковуваного в даний момент часу. Тоді за час $T(R)$ будуть упаковані сфери радіусом R і більше, кількість яких виражається рівнянням (2.2):

$$n(R) = a \int\limits_{t^0 < T(R)} e^{-a\gamma \int\limits_0^{t^0} [R(t)+R(t^0)]^s dt} dt^0 \quad . \qquad (2.2)$$

Співвідношення (2.2) дозволяє оцінити густину заповнення сферами для пуасонівського вибору центрів сфер в упаковці. Для випадку упаковок рівних сфер граничне значення функції густини буде визначатися рівнянням (2.3):

$$\rho = a\omega \int\limits_0^{\infty} R^s e^{-a\varpi \int\limits_0^{t^0} (2R)^s dt} dt^0 = 2^{-s}. \qquad (2.3)$$

Будь-який інший розподіл сфер за розмірами тільки збільшує густину заповнення, оскільки під інтегралом другий член твору росте швидше першого.

Таким чином, значення рівняння (2.3) характеризує густину упаковки, яка може бути отримана шляхом вибору пуасонівських точок і якості центрів сфер. Для звичайної тривимірної системи ця густина рівна 1/8. Звідси висновок – для густини заповнення 1/8 і вище упаковка сфер відхиляється від пуасонівської. Ця ж оцінка буде справедливою і для упаковок частинок неізометричної форми, для чого достатньо кожному елементу зіставити сферу радіусом, рівним половині діаметра, тобто максимального розміру даного елемента.

2.3 Моделювання з використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій

Комп'ютерні моделі – включаючи методики, алгоритми та програмне забезпечення – ефективно використовуються в наукових і технологічних дослідженнях. Застосування процесу засипки порошків значно розширює можливості вивчення структурно неоднорідних матеріалів. Поєднання комп'ютерних моделей із методами їх моделювання є одним із найбільш перспективних напрямів сучасних досліджень.

Традиційно під комп'ютерним моделюванням розуміють моделювання, що здійснюється з використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій. Проте досі не встановлено чіткої межі між комп'ютерним моделюванням та іншими його видами, оскільки й у інших типах моделювання комп'ютер може відігравати важливу роль. Так, під час математичного моделювання ключовим етапом є побудова математичних моделей на основі експериментальних даних, що сьогодні практично неможливо виконати без застосування комп'ютерно-інтегрованих технологій [4].

Упродовж останніх років завдяки розвитку графічних інтерфейсів та програмних графічних пакетів активно поширилося комп’ютерне структурно-функціональне моделювання [17].

Комп’ютерне моделювання є одним із методів розв’язання завдань аналізу або синтезу складних систем на основі використання їхніх комп’ютерних моделей. Його сутність полягає в отриманні якісних і кількісних результатів шляхом дослідження створеної моделі. Якісні висновки, які отримані внаслідок такого аналізу, дають змогу виявити та дослідити раніше невідомі властивості складної системи, а також прогнозувати її структуру, динаміку розвитку, стійкість і цілісність. Кількісні результати, своєю чергою, здебільшого мають прогностичний характер – вони пояснюють минулі або передбачають майбутні значення параметрів, що описують систему.

Об’єктами комп’ютерного моделювання можуть бути як окремі технологічні процеси (наприклад, поведінка матеріалу та вплив на нього зовнішніх факторів), так і виробничі лінії чи навіть цілі промислові підприємства.

Мета комп’ютерного моделювання може бути різною, однак найчастіше воно виступає центральним елементом системного аналізу. Під системним аналізом розуміють сукупність методів і підходів, що застосовуються для підготовки та прийняття технічних, організаційних чи економічних рішень.

Під імітаційним (програмним) моделюванням розуміють такий вид моделювання, за якого логіко-математична модель досліджуваного об’єкта подається у формі алгоритму або блок-схеми (рис. 2.2), що описує його функціонування. Ця модель реалізується як програмний комплекс для комп’ютерно-інформаційних систем, який, виконуючи послідовність обчислень і відображаючи їх результати графічно, дозволяє відтворювати (імітувати) процеси роботи об’єкта, а також моделювати вплив на нього різноманітних, здебільшого випадкових, факторів.

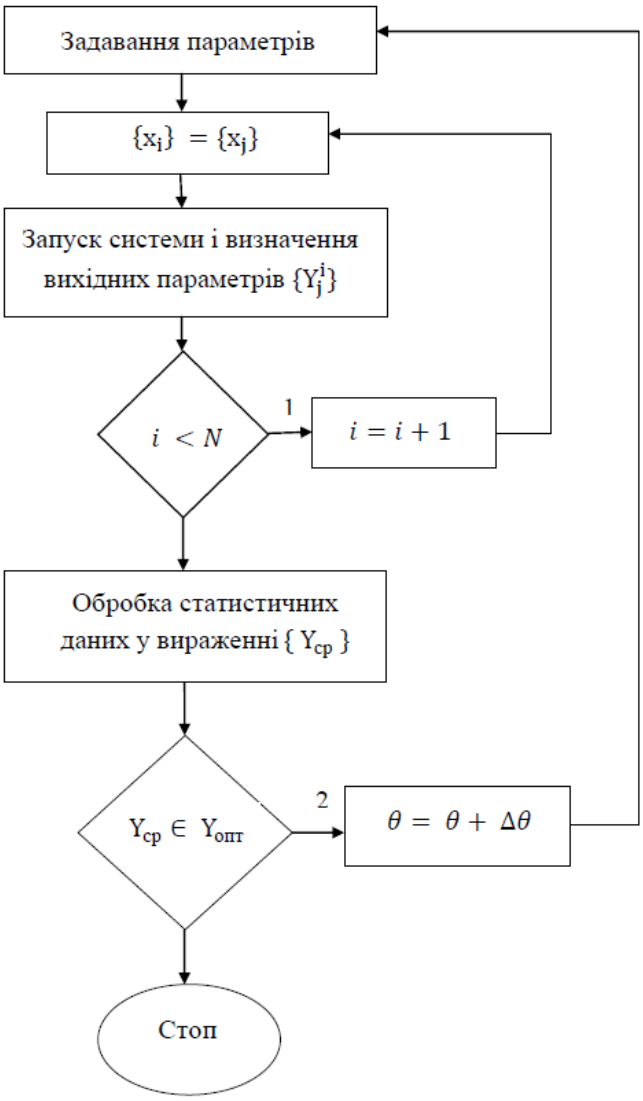

Рисунок 2.2 – Алгоритм імітаційного моделювання [17]

Висновок до розділу 2

Аналіз сучасного стану модельних досліджень свідчить, що прогнозування структурних характеристик матеріалів, отриманих у результаті комплексу технологічних операцій із відомими параметрами, є цілком можливим завдяки використанню комп'ютерно-інтегрованих технологій.

Комп'ютерні моделі – зокрема методики, алгоритми та програмне забезпечення – можуть ефективно застосовуватися в наукових і технологічних

дослідженнях. При цьому процес засипки порошків значно розширює можливості вивчення структурно неоднорідних матеріалів.

Запропонована реалізація комп’ютерних моделей дає змогу вирішувати структурно-імітаційні завдання в таких напрямах.

1. Прогнозування закономірностей формування структури та властивостей матеріалів із урахуванням розмірів структурних елементів шихти.

2. Визначення кореляцій між складом, будовою та експлуатаційними характеристиками матеріалів.

3. Запровадження безвідходного виробництва виробів широкого призначення.

4. Зменшення енергоспоживання.

5. Скорочення трудових витрат.

6. Контроль параметрів структури порошкових матеріалів у процесі їх виготовлення.

РОЗДІЛ 3
АНАЛІЗ СТРУКТУРНО-НЕОДНОРІДНИХ МАТЕРІАЛІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

3.1 Моделювання структури матеріалів

Моделювання структури дисперсних матеріалів дає змогу одержати додаткові відомості про процеси, що відбуваються під час їх виготовлення та експлуатації, і таким чином, спрощує контроль та оптимізацію технологічних процесів. Важливою умовою при цьому є наявність даних про координаційне число в дисперсній системі, тобто середню кількість контактів частинки з іншими. Цей показник дає змогу оцінити якість структури дисперсних матеріалів і слугує базовим параметром під час побудови апроксимаційних залежностей фізичних властивостей від пористості. На основі тривимірної моделі пористої структури, представленої системою хаотично упакованих сфер однакового діаметра, можна аналізувати середнє та критичне координаційне число дисперсних систем, а також співвідношення однофазних і міжфазних контактів у двофазних монодисперсних сумішах, які не залежать від об’ємної концентрації компонентів [18].

У даному дослідженні вибір рівня структури безпосередньо зумовлений цільовим призначенням розроблюваної комп’ютерно-імітаційної моделі. Оскільки початковим етапом технологічного процесу є насипання та упаковка порошків із порівняно низькою густиною, особливого значення набуває моделювання нещільної упаковки сферичних частинок. Як найпростіший підхід до опису такої структури нами використано модель випадкової щільної упаковки монодисперсних сферичних частинок.

Отже, ключовою перевагою дискретного підходу є підвищена математична точність і ґрунтовне фізичне обґрунтування отриманих результатів. Водночас слід підкреслити, що проаналізовані підходи до дослідження дисперсних матеріалів не є ізольованими чи взаємовиключними. Вони органічно доповнюють один одного, а їх комплексне застосування дає

змогу сформувати найбільш повне уявлення про закономірності поведінки дисперсного середовища в процесі його формування.

Крім того, процеси, що відбуваються під час пресування та спікання, можуть бути змодельовані з використанням клітинкових автоматів. Комп'ютерна реалізація таких моделей створює можливості для розв'язання структурно-імітаційних задач у таких основних напрямах [1]:

1. Передбачення закономірностей формування структури та властивостей матеріалів.

2. Виявлення кореляційних залежностей між параметрами.

3. Моделювання процесів руйнування на поліедричних структурах із наперед заданими фізико-механічними характеристиками.

3.2 Ймовірнісно-геометрична концепція випадкових структур матеріалів

На сьогодні систематичне вивчення матеріалів здебільшого здійснюється із застосуванням експериментальних методів. Аналітичні підходи розвинені недостатньо, що зумовлено браком відповідного математичного апарату. Виявлення окремих анізотропних властивостей як природних, так і штучних матеріалів зумовлене впливом зовнішніх примусових факторів.

Водночас анізотропні відхилення незначною мірою залежать від напрямлених впливів, що це додатково підтверджує ізотропний характер властивостей матеріалів. У зв'язку з цим їхню структуру неможливо описати як просторове чергування систем однакових геометричних фігур, подібно до підходів, що застосовуються в теорії кристалічних ґраток. Така особливість суттєво ускладнює дослідження взаємозв'язків між властивостями композицій і їх структурою з використанням класичних методів.

Відсутність такого порядку зумовлює геометричний підхід до аналізу структурно-неоднорідних матеріалів, у межах якого елементарний

структурний підхід розглядається як імовірнісна конфігурація частинок, характерна для конкретного матеріалу. Стохастичний характер розподілу структурних елементів в об’ємі виправдовує застосування методів теорії ймовірностей і математичної статистики для композиційних матеріалів [17]. Ймовірнісно-геометрична концепція опису структури композицій є найбільш узагальненою, оскільки будь-який спостережуваний порядок у структурі матеріалів можна розглядати як окремий випадок цієї концепції.

У даному науковому дослідженні розглядається моделювання процесів заповнення частинками, в межах якого вирішуються такі основні завдання:

1. Аналізуються взаємозв’язки між мікроскопічними структурними та фізичними властивостями композицій і загальною структурою матеріалу.

2. Вивчаються механізми формування структури із наперед заданими геометричними характеристиками.

3. Досліджуються можливості керування процесами структуроутворення з метою одержання матеріалів із необхідними та оптимізованими властивостями.

Розглянемо випадкові упаковки та структуру матеріалів як результат стохастичних процесів заповнення. Способи упаковки елементами композицій полягають у послідовних спробах заповнити заданий об’єм шляхом додавання окремих елементів за умови, що вони не перетинаються ні з уже упакованими частинками, ні з межами області упаковки. Однак такий критерій є надто загальним і майже не піддається аналітичному дослідженню [19]. Тому доцільно застосувати іншу схему заповнення, яка приводить до еквівалентного результату, але має чіткішу математичну формалізацію.

Для переходу до цієї схеми кожній частинці упаковки надається певний момент часу, а процес формування (засипання) розглядається як безперервний у часі. За такого підходу чергову частинку відкидають, якщо її випадково згенероване положення перетинає межі області упаковки, накладається хоча б на одну з уже розміщених частинок або ж суперечить часовій послідовності попередніх спроб заповнення.

Положення кожного елемента в прийнятій моделі структури композицій визначається за випадковим імовірнісним розподілом у просторі. Такий спосіб вибору координат надалі будемо називати пуасонівським. Однак пуасонівський характер зберігається лише доти, доки чергова спроба розміщення елемента не відхиляється відповідно до критеріїв моделі. Хоча сам процес залишається пуасонівським, сукупний просторовий розподіл елементів у заданому об’ємі в результаті вже відрізняється від класичного пуасонівського закону [1].

Унаслідок цього стандартний математико-статистичний апарат виявляється малоефективним під час аналізу випадкового заповнення, а за високої густини упаковки стає практично непридатним через значні похибки. Тому єдиним прийнятним підходом до дослідження випадкових заповнень і закономірностей їх формування є метод статистичних випробувань (метод Монте-Карло), що ґрунтується на багаторазовому відтворенні процесу випадкового заповнення з метою накопичення статистичних даних [20].

Під час практичної побудови математичних моделей – як упаковок сферичних, так і несферичних частинок – не завжди вдається забезпечити рівномірний у часі розподіл елементів за розмірами сфер. Окрім того, нерідко виникає потреба формувати упаковки з густиною заповнення, що істотно перевищує значення 2. За таких умов пуасонівський спосіб вибору координат центрів сфер, починаючи з певного моменту, стає ускладненим, і частина розміщених елементів уже не підпорядковується пуасонівському закону.

Унаслідок цього аналітичні оцінки, отримані на основі пуасонівських елементів, втрачають свою прийнятність, що зумовлює необхідність додаткового їх аналізу за допомогою методу статистичних випробувань на скінченних математичних моделях. Тому доцільно використовувати можливості комп’ютерно-інформаційних систем, у пам’яті яких узагальнені координати елементів упаковки зберігаються у матричній формі. На таких моделях за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення можуть бути обчислені будь-які структурні та фізичні характеристики, поєднуючи

алгоритми випадкового заповнення з розрахунково-обчислювальними процедурами, що відповідають конкретним фізико-структурним властивостям матеріалу.

3.3 Моделювання заповнення простору структури матеріалу на основі випадкового розподілу

Математична модель структури композицій, елементи якої мають сферичну форму, є найпростішою з точки зору розроблення алгоритмів і програмної реалізації із використанням комп'ютерно-інтегрованих технологій. Така модель, по-перше, потребує мінімальної кількості узагальнених координат для математичного опису структури – для кожної сфери достатньо трьох координат центра в певному замкненому просторі. По-друге, їй притаманні найбільш компактні, прості та швидкодіючі алгоритми.

Під час моделювання упаковок сфер зменшується споживання оперативної пам'яті, що дає змогу збільшити розмір представницького осередку, водночас витрати обчислювального часу комп'ютерних ресурсів залишаються мінімальними [1].

В упаковках однакових за розміром сфер їхній радіус можна розглядати як спільний параметр і виключити з переліку узагальнених координат. У такому випадку матриця узагальнених координат міститиме лише три стовпці. Для упаковок зі східчастим розподілом сфер за розмірами можливе об'єднання частинок у групи за типорозмірами.

При цьому матриця узагальнених координат також може складатися з трьох стовпців, проте вона є частиною розширеної структури, у якій кожній групі рядків відповідає додатковий параметр – характерний радіус відповідної групи сфер [17].

Рідкозаповнені упаковки характеризуються дуже низькою густиною, за якої розмірами елементів упаковки можна знехтувати порівняно з відстанями між ними. За таких умов взаємний вплив сусідніх елементів на положення

кожного окремого елемента є вкрай незначним, тому упаковку можна апроксимувати множиною випадково розміщених у просторі точок, що відповідають центрам мас елементів, тобто центрам сфер. Фактично упаковка сфер зводиться до покриття простору цими елементами, імовірність їх перетину при цьому є мізерно малою.

Математична модель такої упаковки формується шляхом генерації випадкових чисел, рівномірно розподілених по заданому об'єму, які задають координати центрів упакованих сфер. За рівномірного просторового розподілу елементів імовірність їх появи в певному замкнутому об'ємі підпорядковується пуасонівському закону, у зв'язку з чим такі упаковки доцільно називати пуасонівськими. Густина заповнення в цьому випадку не може перевищувати 0,125. Проте на практиці подібну модель доцільно застосовувати лише за густини заповнення не більшої ніж 0,01-0,05, оскільки зі зростанням густини швидко збільшується кількість невдалих спроб формування таких упаковок.

Крім того практика застосування нових матеріалів на основі металевих порошків показує, що реалізація у повному обсязі їх експлуатаційних характеристик потребує суттєвого збільшення рівня прогнозування фізико-механічних властивостей матеріалів та розробки нових методів моделювання, який передбачає комплексний аналіз процесів формування матеріалів [20].

Нехай середній розмір кульок рівний d, а заповнюють вони частку об'єму $\alpha \in (0; 1)$ від загального об'єму контейнера (рис. 3.1).

Для опису випадкового розподілу кульок пропонується описувати пори між ними (пустоти) за допомогою такої моделі

Дослідження фізико-структурних властивостей засипок на математичних моделях проводиться методом статистичних випробувань окремих випадкових заповнень, на основі чого здійснюється відповідна статистична обробка [21].

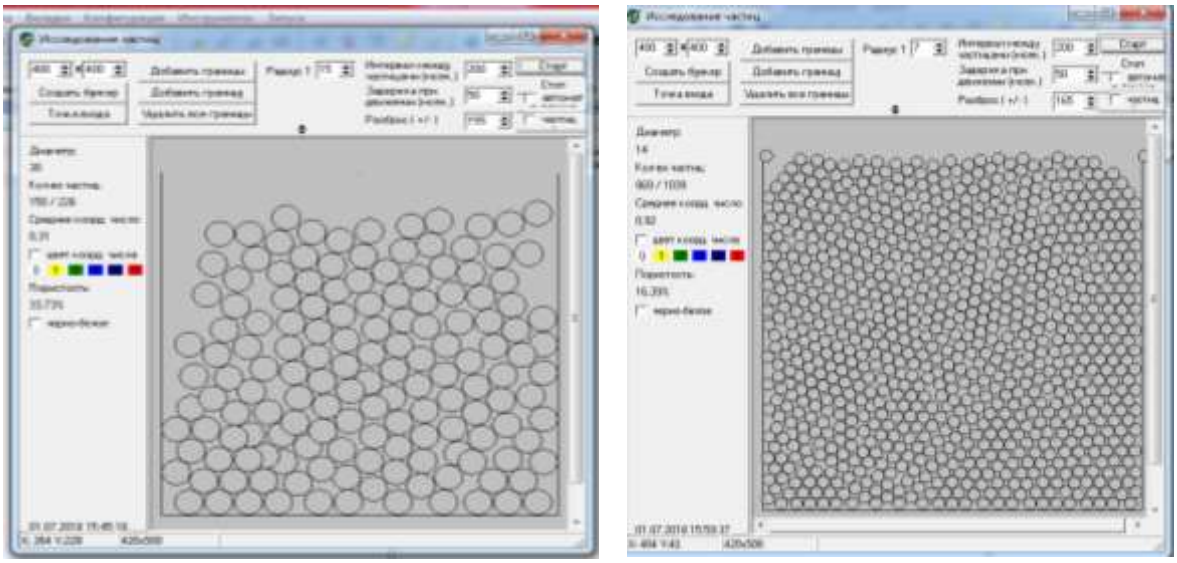

Рисунок 3.1 – Приклади візуалізації засипки двомірної упаковки за розробленою комп’ютерно-імітаційною моделлю [1]

У даному двомірному випадку для більш простих випадкових полів a узагальнююче значення $\bar{a}$ можна правильно визначити. Саме тому цю модель випадкових пор потрібно ще і ускладнити. Розміри елементів визначаються відносними одиницями щодо розміру простору, який заповнюється. Обсяг елементів упаковки характеризує щільність заповнення в заданому обсязі частиками.

Загальна методика визначення щільності і дисперсності певного обсягу полягає в тому, що за допомогою математичного моделювання визначають упаковки випадкового заповнення у заданий обсяг певного контейнера заданої форми.

Висновки до розділу 3

Розроблена теорія математичних моделей, які призначені для дослідження структури композицій, є одними з найпростіших з точки зору побудови алгоритмів і програмної реалізації в комп’ютерно-інформаційних системах. По-перше, такі моделі потребують мінімальної кількості узагальнених координат для математичного опису структури – для кожної

сфери достатньо трьох координат її центра в певному замкнутому просторі. По-друге, їм властиві найбільш компактні, прості та швидкодіючі алгоритми.

Практична реалізація створених комп'ютерно-імітаційних моделей дає змогу розв'язувати структурно-імітаційні задачі за такими основними напрямами:

1. Прогнозування закономірностей формування структури матеріалів з урахуванням розмірів і форми структурних елементів шихти СНМ.

2. Встановлення кореляційних зв'язків між складом, будовою та властивостями СНМ.

Також показано, що невизначеність геометрії впливає на міцність складових компонентів, які знаходяться на початковій стадії заповнення форми та наведено теоретичні передумови моделювання випадкового розміщення порошку на стадії засипки у бункер з урахуванням фізичних параметрів.

Застосована методика розрахунку фізичних параметрів, які закладаються для дослідження реальних двомірних упаковок, що дозволяє визначати вплив фізичних параметрів порошку на процес засипки його у форму.

РОЗДІЛ 4
МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ СТРУКТУР МАТЕРІАЛІВ ЧАСТИНОК РІЗНОЇ ФОРМИ

4.1 Моделювання випадкових структур матеріалів частинок сферичної форми

Однією з основних вимог до конструкційних деталей є рівномірний розподіл щільності по об’єму пресовки. Визначаючий вплив на розподіл щільності має засипка порошку в матрицю. Засипка – перший етап технології порошкової металургії. Наступними етапами є ущільнювання, спікання та інші процеси, властивості яких базуються на результатах засипки.

Дуже проблематичним є на основі одних лише даних про фракційний склад порошку передбачити вихідні параметри упаковки: інтегральну густину, локальну густинуё і її розподіл, пористість, координаційне число.

Комп’ютерне моделювання структури порошкових тіл вкладанням кульок можливе при розгляді порошкового середовища з точки зору його мезоструктури. Вона є максимально близькою до макроскопічного рівня і впливає на макроскопічні характеристики матеріалів. Тому, пошук оптимальних умов засипки на комп’ютерних моделях є альтернативним варіантом експериментам.

Структура порошкових тіл, як правило, моделюється пакуванням сферичних частинок. Розглядають або регулярні упаковки, тобто набір однакових елементів закономірно розміщених в просторі, або моделі, в яких елементи структури розміщені випадковим чином.

Ми використали базовий алгоритм пакування в бункер, який не обмежує кількість пакувальних частинок і не дає вимушену періодичність. За основу взято алгоритм ком’ютерного моделювання упаковки рівних за розмірами частинок в двохмірній постановці задачі. Суть його полягає в наступному. Вертикально розміщений прямокутник з робочим полем X×Y заповнюється частками. Сферичні частинки генеруються в залежності з заданим законом

розподілення розмірів і падають в бункер з плоскими стінками або в одну точку, або у випадково вибрану. Тобто, кожна нова частинка, що вводиться в систему, довільним чином розміщується на горизонтальній прямій за межею верхнього краю поля і рухається вниз дискретними кроками, рівними одиниці роздільної здатності монітора. Ті частинки, які зустрічають на своєму шляху перешкоду у вигляді вже зафіксованих частинок, продовжують рух вниз, «спускаючись» по поверхні тієї грані свого сусіда, з якою відбувся контакт, до зустрічі з новою зафіксованою частинкою або дном. У випадку контакту з новою частинкою ковзання продовжується по його гранях до тих пір, поки частинка не торкнеться дна чи продовження руху не призведе до її підйому.

Таким чином, можна сформулювати алгоритм руху наступної кульки:

1. Випадковий вибір початкової позиції для падіння кульки.

2. Аналіз обмежень.

3. Визначення нового напрямку руху кульки. При відсутності допустимого напрямку—зупинка і вибір наступної кільки для пакування.

4. Визначення чергової траєкторії руху. Це пряма або відрізок кола.

5. Обчислення точок перетину сегмента траєкторії зі всіма упакованими кульками або стінками бункера. Повернення до п. 2.

Як відомо, металічні порошки характеризуються комплексом властивостей, значення яких обумовлені технологією виготовлення та хімічним складом вихідного матеріалу. До них відносяться розміри та форма часток. Ці властивості в свою чергу визначають експлуатаційні характеристики проникливих матеріалів.

Найпростішим варіантом комп’ютерного моделювання випадкової упаковки є пакування однорозмірних сфер, тобто частинок одного розміру. На практиці, як не рідко буває, використовують порошок з частинок різних фракцій і форм. Важливим є процес регулювання і контролю засипки порошку з частинок різних фракцій.

Умови неперетину двох сферичних (круглих) частинок є суттєво складнішими та пов’язані з визначенням відсутності розв’язків системи двох

квадратних рівнянь. Один із підходів до перевірки неперетинання полягає в тому, що з рівнянь обох сфер в явному вигляді виокремлюють одну з координат, наприклад аплікату. При цьому для сфери з більшою аплікатою центра беруть радикал із від'ємним знаком, а для іншої – з додатним. Далі з першого рівняння віднімають друге й знаходять мінімум отриманої різниці, наприклад, методом найшвидшого спуску. Якщо знайдений мінімум не набуває від'ємного значення, це свідчить про відсутність перетину сфер. Аналогічним чином визначаються умови неперетину сферичних частинок із межами контейнера .

На рисунку 4.1 наведено інтерфейс розробленої комп'ютерно-імітаційної моделі, який було використано для перевірки її адекватності шляхом моделювання процесу засипання прямокутного контейнера сферичними частинками. Слід зазначити, що створена комп'ютерно-імітаційна модель забезпечує можливість моделювання розміщення частинок довільної геометричної форми.

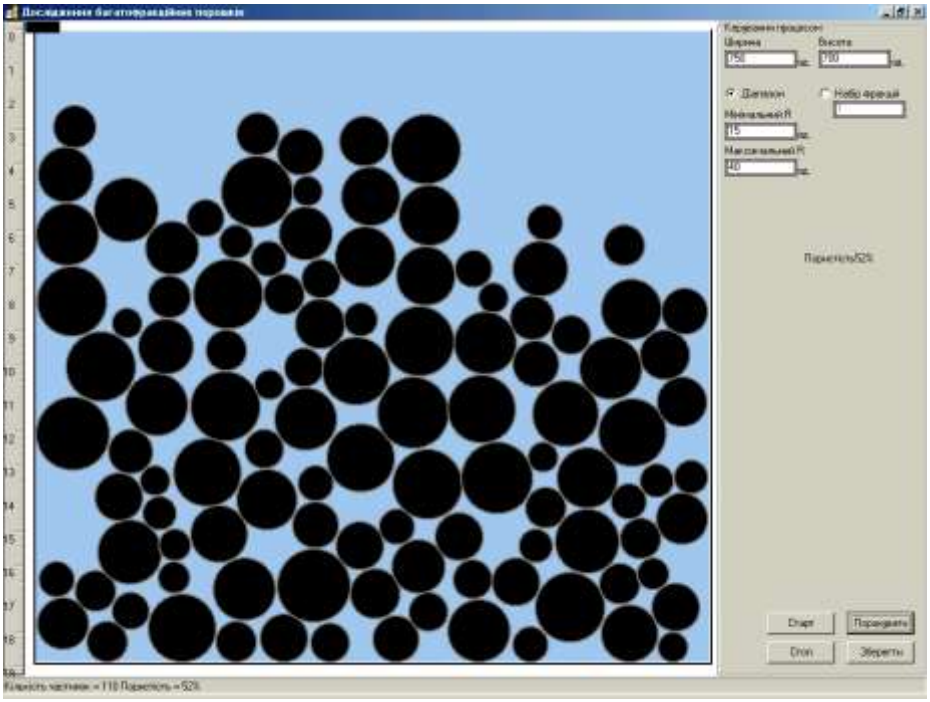

Рисунок 4.1 – Моделювання процесу засипки частинок порошку в бункер (вибір діапазону фракцій)

Реалізація такого варіанта комп'ютерного моделювання дозволяє дослідити вплив процентного вмісту частинок різних розмірів на досягнення максимальної щільності упаковки. Питання пошуку оптимальних по зернистості та складу упаковок цікавить спеціалістів самих різних галузей.

4.2 Моделювання випадкових структур матеріалів частинок несферичної форми

Тут кожний елемент описується узагальненими координатами – координатами центрів основ і радіусом перетину циліндра. Сформулюємо умову неперетину, де необхідно включити умову неперетину сфер основ одного циліндра з сферами основи іншого визначається рівнянням (4.1):

$$\begin{array}{l}(x_{ki}-x_{pj})^2+(y_{ki}-y_{pj})^2+(z_{ki}-z_{pj})^2\geq(R_i-R_j)^2;\\ i=1,2,...,n;\ j=1,2,...,n;i\neq j;\\ k=1,2;\ p=1,2\end{array}\quad , \qquad (4.1)$$

де n – число упакованих елементів;

i, j – номер елемента в упаковці;

k і p – номер основи циліндра.

До умови (4.1) необхідно також додати умови неперетину сфер основ одного циліндра з поверхнею іншого. Для цього слід по черзі опустити перпендикуляри з центрів основ одного циліндра на вісь іншого і знайти точку їх перетину, тому необхідно вирішити систему рівнянь прямої осі і площини, перпендикулярної їй і проходячої через центр основи циліндра (рис. 4.2).

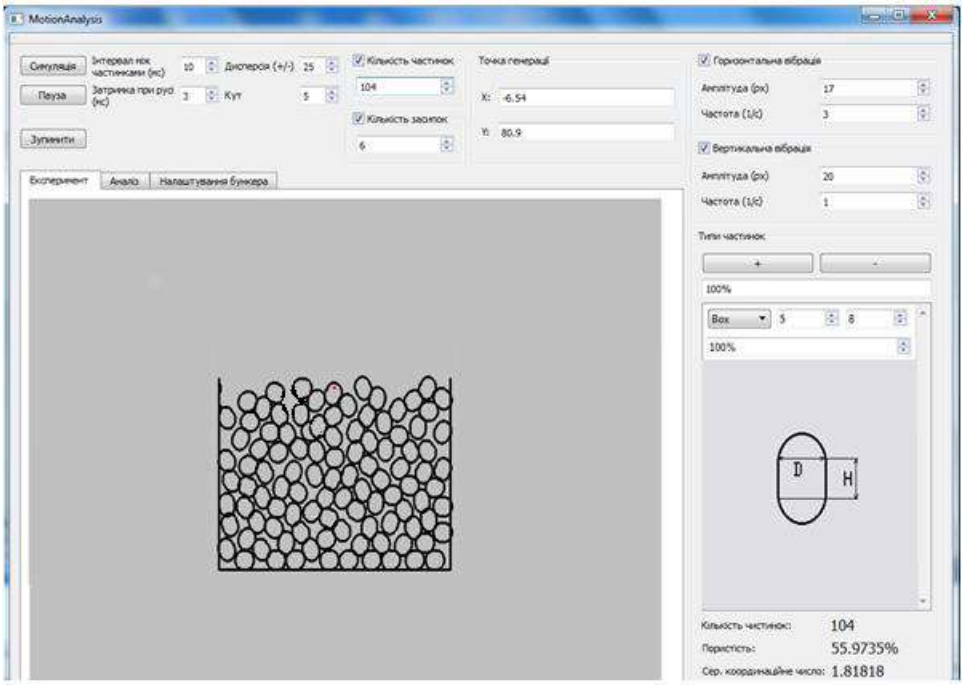

Рисунок 4.2 – Інтерфейс комп’ютерної програми випадкового пакування часточок несферичної форми у прямокутному контейнері

Мінімізація пористості є важливою при виготовленні деталей високої міцності, тоді як велика чи помірна пористість важлива для елементів фільтрувальних установок.

Приклади засипок часточок несферичної форми (два півкола поєднані відрізками прямих) зображені на рисунку 4.3.

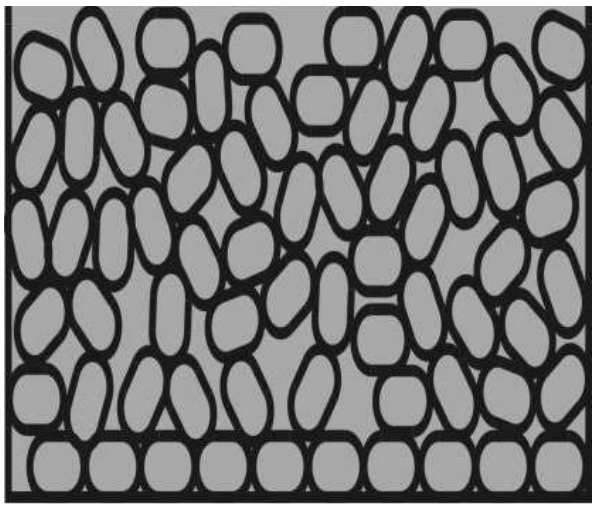

Рисунок 4.3 – Приклад засипки часток несферичної форми

Було виконано серію засипок із застосуванням описаного вище комп’ютерно-імітаційного алгоритму. Для моделювання використовували частинки діаметром 10, 14 і 24 мкм, які засипалися у прямокутні бункери різної ширини при фіксованій висоті 600 мкм. Для кожної комбінації розміру бункера та діаметра частинок було проаналізовано по п’ять варіантів засипки.

Також досліджувався вплив геометричних розмірів бункера на пористість шару. У цих експериментах також застосовувалися частинки діаметром 24, 14 і 10 мкм, при цьому для кожного значення ширини бункера і розміру частинок виконували по п’ять засипок. Отримані результати подано в таблиці 4.1.

Таблиця 4.1 – Залежність пористості від діаметра чатинок

Діаметр D, мкм	Середня пористість для заданого діаметра, %
10	19,5
14	21,4
18	22,1
22	22,7
26	23,35
30	24,6

Звідси можна зробити висновок, що отримані значення пористості із збільшенням розмірів частинок зростають (рис. 4.4). Отже, описана модель засипки несферичних частинок для цього випадку адекватно відображає пористість нашої упаковки.

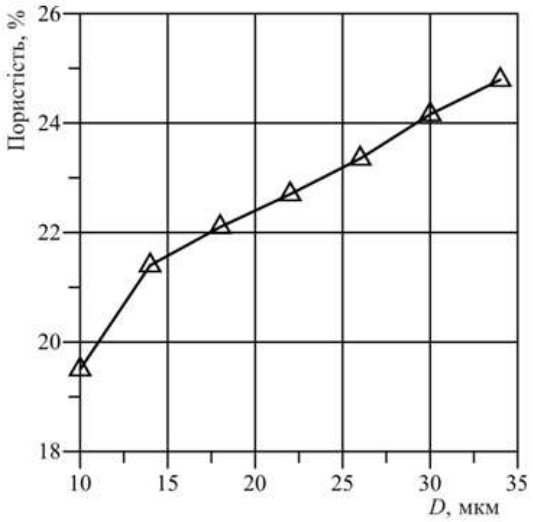

Рисунок 4.4 – Залежність пористості від діаметра частинок

4.3 Функція радіального розподілу статичних сумішей пуасонівського типу

Функція радіального розподілу належить до найбільш важливих і універсальних структурних характеристик композиційних матеріалів [1]. Вона визначає характер енергетичної взаємодії між частинками, необхідної для обчислення та аналізу широкого спектра узагальнених фізичних властивостей неоднорідних матеріалів. До таких властивостей належать діелектрична та магнітна проникність, електрична провідність, теплопровідність, координаційні характеристики частинок, параметри деформування, оцінка кінцевого результату та інші.

Функція радіального розподілу визначається як відношення локальної густини заповнення на певній відстані від центра вибраної фіксованої частинки до середнього значення густини заповнення даної композиції.

У структурі реальних неоднорідних матеріалів елементи хоча і займають в упаковці випадкове положення, проте виключити взаємний вплив сусідніх елементів не можна, тобто сусідні елементи в упаковці мають деякі кореляційні зв’язки. У загальному випадку можна уявити, що всі елементи знаходяться в деякому взаємному кореляційному зв’язку, але, як показує досвід дослідження таких матеріалів, зв’язками дальнього порядку практично

можна нехтувати [17]. У цьому зв’язку висувається задача створення математичних моделей випадкового заповнення з урахуванням впливу ближнього порядку, принципи створення яких були розглянуті вище, а конкретне виконання залежить від набору апріорних даних.

При моделюванні випадкових структур як математична модель виступає матриця узагальнених координат, кількісна характеристика моделі і моделюючий алгоритм. Тому в задачах дослідження неоднорідних зернистих матеріалів доцільно розглядати математичну модель структури і процес формування її роздільно.

На рисунку 4.4 наведено залежності пористості від ширини бункера, що представлені суцільними кривими. Вони побудовані на основі апроксимації методу найменших квадратів масиву даних, отриманого за результатами комп’ютерно-імітаційного моделювання. Дискретні значення пористості для окремих значень відносної ширини бункера позначено відповідними умовними позначеннями.

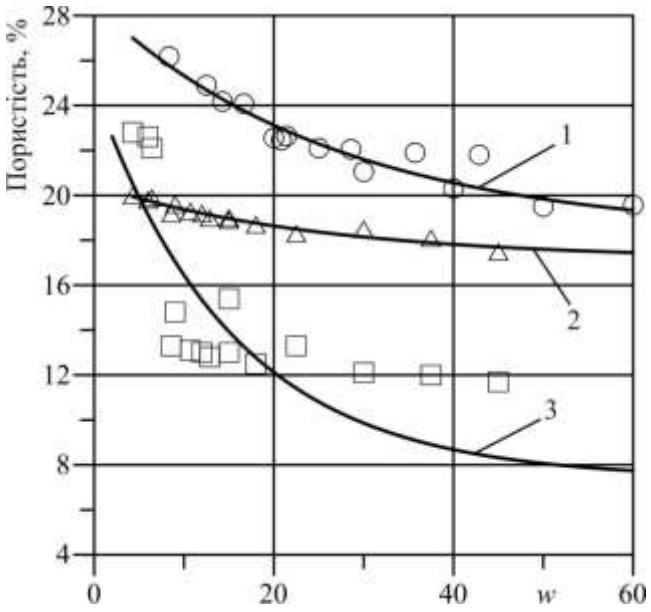

Рисунок 4.4 – Залежності пористості *Q* від співвідношення ширини квадратної прес-форми і розміру часточок *w*, отримана шляхом апроксимації даних числового експерименту: 1 – круглі часточки; 2 – трикутні часточки; 3 – квадратні часточки

Таким чином, спостерігається достатньо добра узгодженість між даними та результатами комп’ютерно-імітаційних експериментів. Це свідчить про те, що результати комп’ютерного імітаційного моделювання не мають суто стохастичного характеру, а підкоряються певним закономірностям, що додатково підтверджує достовірність отриманих результатів моделювання пористості із застосуванням запропонованих алгоритмів. Водночас запропонований підхід забезпечує можливість отримання зручних для практичного використання інженерних залежностей, які пов’язують основні фізико-механічні характеристики СНМ, зокрема пористість, із параметрами частинок вихідних сумішей та геометричними розмірами технологічного обладнання (прес-форм).

Висновки до розділу 4

Аналіз сучасного стану модельних досліджень показує, що моделювання структурних характеристик матеріалів, які отримуються в результаті сукупності технологічних операцій з відомими характеристиками можливий за допомогою комп’ютерно-інтегровнаих технологій.

Слід підкреслити, що під час моделювання упаковок сфер суттєво зменшується час на роботу між комп’ютерно-інформаційними системами, а також з’являється можливість проводити дослідження без залучення дорогих і трудомістких експериментів. Це дає змогу впроваджувати безвідходні технології виробництва продукції широкого призначення, заощаджувати енергетичні та матеріальні ресурси, а також скорочувати трудові витрати завдяки зменшенню кількості технологічних операцій і підвищенню рівня автоматизації процесів.

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ ТА РЕКОМЕНДАЦІЇ

У ході виконання кваліфікаційної роботи було вдосконалено наявні технології виготовлення порошкових виробів із підвищеними механічними та функціональними характеристиками на основі моделювання процесів зі застосуванням комп'ютерних імітаційних моделей шляхом оптимізації їх ущільнення за допомогою комп'ютерно-інтегрованих технологій, а саме:

1. Було досліджено загальні характеристики системи, що моделюється: пористість та її розподіл, середнє координаційне число. Особливу увагу було приділено визначенню розподілу пористості, оцінці впливу розмірів і форми частинок на пористість, а також вивченню процесів, що супроводжують формування структурно-неоднорідних матеріалів.

2. Вивчено та досліджено механічну поведінку елементів модельного середовища: передачу сил через частинки, переміщення часток, умови стабільності дисперсної системи. Було проведено прогнозування структурних характеристик матеріалів, отриманих у результаті комплексу технологічних операцій із відомими параметрами завдяки використанню комп'ютерно-інтегрованих технологій

3. Проаналізовано структурні елементи, застосувавши модель дискретного середовища для опису матеріалу методами суцільного середовища. Показано, що за рівномірного просторового розподілу елементів імовірність їх появи в певному замкнутому об'ємі підпорядковується пуасонівському закону. Густина заповнення не перевищила 0,125. Тому подібну модель доцільно застосовувати лише за густини заповнення не більшої ніж 0,01-0,05, оскільки зі зростанням густини швидко збільшується кількість невдалих спроб формування таких упаковок.

4. Розроблено комп'ютерні імітаційні моделі для обчислювальних експериментів та оптимізації технологічних параметрів. Доведено, що отримані значення пористості із збільшенням розмірів частинок зростають.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Повстяной О. Ю. Багатошарові пористі проникні матеріали з регульованою пористістю з відходів промислового виробництва : дис...докт. техн. наук: 05.02.01 / Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України. Київ, 2021. 345 с.

2. Пашко А. О. Статистичне моделювання випадкових величин, векторів та процесів : конспект лекцій. Київ, 2025. 85 с.

3. Калініна І. О., Гожий О.П. Моделювання складних систем на основі кольорових мереж Петрі: навч. посіб. Херсон: вид-во ФОП Вишемирський В.С, 2021. 58 с.

4. Балик Н. Р. Вибрані питання комп'ютерного моделювання процесів і явищ: підручник. Тернопіль, 2022. 272 с.

5. Кузяєв І. М. Основи комп'ютерного моделювання технічних систем : монографія. Дніпро : ДВНЗ УДХТУ, 2020. 392 с.

6. Соколовський Я. І., Шабатура Ю.В., Виклюк Я. І. Моделювання систем у GPSS WORLD : навч. посіб. Львів : Видавництво «Новий Світ-2000», 2021. 288 с.

7. Вислоух С. П., Волошко О. В., Тимчик Г. С., Філіппова М. В. Комп'ютерне моделювання процесів та систем. Чисельні методи : підручник. Київ : Вид-во «Політехніка», 2021. 228 с.

8. ДСТУ ISO/IEC 2382:2017 (ISO/IEC 2382:2015, IDT) Інформаційні технології. Словник термінів. [Чинний від 2019–01–01]. ДП «УкрНДНЦ», 2020. 468 с.

9. Кравченко І. В., Микитенко В. І., Тимчик Г. С. Комп'ютерне моделювання: системи і процеси : навч. посібн. Київ : Вид-во «Політехніка», 2022. 215 с.

10. Прус Д. В. Автоматизована система керування технологічним процесом пошиву сорочок. *Actual problems of automation and control:* матеріали XIII Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції молодих учених

та студентів. Випуск № 13. Луцьк: ЛНТУ, 2025. С. 20-24.

11. Oleksandr Povstyanoy, Oleg Zabolotnyi, Victor Rud, Andriy Kuzmov, Halyna Herasymchuk. Modeling of processes for creation new porous permeable materials with adjustable properties. *Advances in Design, Simulation and Manufacturing. DSMIE-2019. Lecture Notes in Mechanical Engineering*. Vol. 1. 2020. Pp. 456-465. doi.org/10.1007/978-3-030-22365-6_46.

12. Trisnaliani L., Syarif A., Effendy S., Tahdid, Daniar R. Effect of Bentonite on the Yield and Composition of Products From Thermolysis of Polystyrene Waste. *Materials at the 4th Forum in Research, Science, and Technology (FIRST-T1-T2-2020)*. Vol. 2. 2021. Pp. 51-56. doi: 10.2991/ahe.k.210205.010.

13. Merlet R. B., Pizzoccaro-Zilamy M.-A., Nijmeijer A., Winnubst L, Hybrid ceramic membranes for organic solvent nanofiltration: State-of-the-art and challenges. *Journal of Membrane Science*. Vol. 599. 2020. p. 117839. doi: 10.1016/j.memsci.2020.117839.

14. Zou D. One-step engineering of low-cost kaolin / fly ash ceramic membranes for efficient separation of oil-water emulsions. *Journal of Membrane Science*. Vol. 621. 2020. P. 118954. doi: 10.1016/j.memsci.2020.118954.

15. Luján-Facundo M. J., Mendoza-Roca J. A., Bes-Piá A., Zuriaga-Agustí E., Mestre S., Palacios M.-D. Low-cost ceramic membranes manufacture using INKJET technology for active layer deposition and validation on membrane bioreactors. *Process Safety and Environmental Protection*. Vol. 176. 2023. Pp. 618-626. doi: 10.1016/j.psep.2023.06.045.

16. Agarwalla A., Mohanty K. Comprehensive characterization, development, and application of natural / Assam Kaolin-based ceramic microfiltration membrane. *Materials Today Chemistry*. Vol. 23. 2022. P. 100649. doi: 10.1016/j.mtchem.2021.100649.

17. Ruban A., Pasternak V., Huliieva N. Prediction of the Structural Properties of Powder Materials by 3D Modeling Methods. *Materials Science Forum*. Vol. 1068. 2022. Pp. 231-238.

18. Ouyang J., Xing X., Chen J., Zhou L., Liu Zh., Heng J. Effects of solvent, supersaturation ratio and silica template on morphology and polymorph evolution of vanillin during swift cooling crystallization. *Particuology*. Vol. 65. 2022. Pp. 93-104.

19. Kaglyak O., Romanov B., Romanova K., Ruban A., Shvedun V. Repeatability of sheet material formation results and interchangeability of processing modes at multi-pass laser formation. *Materials Science Forum*. Vol. 1038. 2021. Pp.15-24.

20. Yang Liu, Hailiang Jia, Han Li, Huimei Zhang, Liyun Tang. Hysteresis in the ultrasonic parameters of saturated sandstone during freezing and thawing and correlations with unfrozen water content, *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*. Vol. 13. 2021. Pp. 1078-1092.