

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу **Донія Олександра Миколайовича** "Комп'ютерні моделі для вивчення процесів формування структури у ливарних алюмінієвих сплавів при їх кристалізації", подану на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.16.04 – Ливарне виробництво.

Актуальність теми роботи.

Дисертація присвячена створенню наукових основ і розробленню математичних та комп'ютерних моделей кристалізації сплавів з метою управління структурою і властивостями литого металу.

Для цього автором запропоновано інформаційний комплекс, який поєднує апаратно-програмну систему для експрес-аналізу алюмінієвих розплавів на базі термічного аналізу з підсистемою імітаційного моделювання кристалізації.

Це дозволяє проводити комп'ютерні експерименти, які дозволяють досліджувати формування структуроутворення при кристалізації металів та бінарних сплавів. Ця інформація є корисною при розробці сучасних ливарних технологій. Тому актуальність даної дисертаційної роботи не викликає сумнівів, адже вона направлена на підвищення конкурентоспроможності продукції ливарного виробництва. Застосування методів імітаційного моделювання та створення комп'ютерних моделей дозволить свідомо підійти до удосконалення ливарних технологій.

Для одержання виливків із заданими характеристиками міцності необхідно здійснювати своєчасний контроль стану рідкого металу. Використання для контролю за станом розплаву термічного аналізу, який ґрунтується на реєстрації типових ефектів твердіння сплавів, є перспективним. В роботі запропоновано оригінальний безконтактний термошумовий термометр.

Робота відповідає основним науковим напрямкам роботи НТУУ "КПІ" і виконувалась в рамках планів робіт НДЛ "Керування якістю рідких металів і сплавів" кафедри "Металознавства і термічної обробки металів" інженерно-фізичного факультету НТУУ "КПІ" відповідно до програм Міністерства освіти і науки України: "Моделювання фазових перетворень при кристалізації і термічній обробці евтектичних структур та розробка композиційних матеріалів для вузлів тертя" (№ державної реєстрації ДР 0100U000871, 2001 - 2002 р.); "Розробка методології технологічного передбачення структуроутворення у функціональних матеріалах для забезпечення якості металовиробів" (№ ДР 0103U000222, 2003 - 2005 р.); "Наукові і технологічні основи управління структурою та властивостями ливарних багатокомпонентних сплавів системи Al-Mg" (№ ДР 0109U000660, 2009 - 2011 р.); "Розробка наукових принципів управління фазово-структурним складом та властивостями вторинних ливарних алюмінієвих сплавів (№ ДР 0106U002326, 2010 - 2012 р.); "Комп'ютерне моделювання та

оптимізація технологічних процесів лиття та термічної обробки" (№ ДР 0119U103606, 2019 - 2020 р.); Ініціативна фундаментальна робота "Дослідження і моделювання фазових перетворень та зміни електронної структури, її впливу на формування нових та модифікацію наявних властивостей матеріалів", 2013 - 2017 р.).

Відповідність роботи спеціальності. Дисертаційна робота повністю відповідає спеціальності 05.16.04 - Ливарне виробництво.

Новизна досліджень та отриманих результатів. У дисертаційній роботі одержано ряд нових дослідних та теоретичних результатів. Розроблено наукові принципи створення комп'ютерних моделей кристалізації як чистих металів, так і бінарних сплавів систем евтектичного типу. Зазначені принципи базуються на поєднанні застосування кліткових автоматів з математичними моделями теплопередачі та дифузії і дозволяють в обчислювальному експерименті спостерігати за структуроутворенням, а також досліджувати динаміку утворення центрів кристалізації металу у рідкому, а також у твердо-рідкому станах за різних умов охолодження. Встановлена залежність критичного розміру зародка при кристалізації металів від теплопровідності, питомої теплоємності, густини та швидкості охолодження розплаву, а також вплив швидкості охолодження на закономірності та динаміку утворення центрів кристалізації. Отримала подальший розвиток динамічна теорія кристалізації металевих сплавів внаслідок уточнення формул розрахунку за кривою охолодження кількості твердої фази і швидкості її росту, а також створена математична модель кристалізації бінарного сплаву. Доведена можливість створення безконтактного індуктивного термошумового перетворювача для вимірювання температури металів в рідкому та твердому станах.

Ступінь обґрунтованості, достовірності та новизни наукових положень, висновків та рекомендацій. Висунуті у дисертації наукові положення, результати, висновки і рекомендації є теоретично обґрунтованими і експериментально підтвердженими. Достовірність результатів роботи підтверджена коректністю постановки задач експерименту і застосуванням сучасних методів досліджень. Достовірність підтверджується також зіставленням і узгодженням отриманих результатів з результатами, отриманими іншими дослідниками, відомими аналітичними моделями. Результати, отримані в роботі апробовані на міжнародних і вітчизняних наукових конференціях і підтверджені публікаціями в фахових і іноземних виданнях.

Практичне значення отриманих результатів. Створено інформаційно-технологічний комплекс прогнозування структури і властивостей литих деталей, який складається з системи імітаційного моделювання кристалізації сплавів та комп'ютерного термічного аналізу, який дозволить оперативно управляти процесом формування литого металу на всіх етапах його одержання за різними технологіями.

Запропоновано метод визначення режимів твердіння виливків з використанням аналізу структуроутворення в них та комп'ютерної моделі

кристалізації сплавів в рамках обчислювального експерименту. Новий метод дає змогу раціонально впливати на структуру виливків шляхом зміни технологічних режимів і керуючих впливів на сплави.

Створений пакет прикладних програм для ЕОМ на основі розробленої методики, яка впроваджена в навчальному процесі інженерно-фізичного факультету Національного технічного університету України “Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського”, і використовується студентами при виконанні лабораторних та курсових робіт за дисциплінами, що пов’язані з процесами кристалізації металів та сплавів.

Повнота викладу основних результатів дисертації в опублікованих працях. Результати дисертаційної роботи викладені у 49 публікаціях: з них 32 статі у наукових виданнях (з них 20 у наукових фахових виданнях України, 10 статей у виданнях іноземних держав, 7 статей у виданнях, які включені до міжнародної наукометричної бази Skopus, 6 включені до міжнародної наукометричної бази Web of Science, 17 статей у виданнях, які включені до міжнародної наукометричної бази Google Scholar), 1 препринт і 16 праць – тези доповідей в збірниках матеріалів міжнародних та республіканських конференцій. Публікації достатньо повно відображають зміст роботи та відповідають встановленим вимогам.

Ідентичність змісту автореферату й основних положень дисертації. Автореферат повною мірою відповідає змісту та основним положенням дисертації.

Оцінка змісту дисертації, її завершеність в цілому. Дисертаційна робота складається зі вступу, шести розділів, висновків (по розділах та загальних), списку використаних джерел літератури (287 найменувань) та додатків. Робота викладена на 392 сторінках (з яких обсяг тексту становить 223 сторінки), містить 83 рисунків, 19 таблиць. Документи про випробовування, впровадження та обговорення наведено в додатку на 15 сторінках. Структура роботи побудована логічно як за змістом, так і за послідовністю розділів.

У вступі розкрито суть наукової проблеми, обґрунтована актуальність теми дисертації. Сформульовано мету роботи та визначені основні задачі дослідження, описані об’єкти дослідження, викладена наукова новизна і практичне значення отриманих результатів, відображений особистий внесок автора і представлена апробація результатів дослідження.

У першому розділі визначено основні чинники, що впливають на процеси формування первинної структури у сплавах, які забезпечують високу якість металовиробів. Зазначено, що для цілеспрямованого керування структурно-міцносними характеристиками литих виробів безпосередньо у процесі їх виготовлення, найбільш доцільно використовувати метод термічного аналізу, який дає змогу фіксувати динаміку процесу їх кристалізації.

Проаналізовано наявні системи контролю стану рідкого металу та прогнозу заданих структури і властивостей металів у закристалізованих сплавах, які побудовані на основі термічного аналізу.

Розглянуто можливість розробки термошумового датчика температури, в основу якого покладено закон Найквіста.

Проведено аналіз методів дослідження процесу кристалізації (як експериментальних, так і теоретичних). Показано, що для достовірного прогнозу структури твердого металу необхідно, щоб моделі кристалізації металів і сплавів сприяли візуалізації процесу структуроутворення при кристалізації. У контексті цього перспективним напрямом є використання імітаційного моделювання та клітинних автоматів. Запропоновано співвідношення для оцінки критичного розміру зародка твердої фази на основі фізичних характеристик металу.

Досліджено також математичні моделі кристалізації металів і сплавів, які розроблені на базі динамічної теорії твердіння металевих виливків. Такі моделі базуються на рівнянні теплового балансу.

Показано, що поєднання способу експрес-аналізу стану металевих розплавів на основі термічного аналізу з підсистемою імітаційного моделювання кристалізації розплавів дало змогу створити багатофункціональний інформаційно-технологічний комплекс для досліджень процесів твердіння металів і сплавів. За результатами аналізу наявних систем і способів для вивчення стану розплавленого металу та процесів кристалізації сплавів, визначено мету та завдання у цій роботі.

Запропонована формула для визначення критичного радіуса зародка кристалізації, яку входять швидкість охолодження та характеристики металів: коефіцієнт теплопровідності, питома теплоємність, густина.

Всі складові даної формули досить просто визначаються експериментально. Зміна їх значень може впливати на критичну величину радіуса зародка твердої фази і на кількість центрів, що приводить до зміни структури закристалізованого металу. Аналіз цього впливу дасть змогу спростити як пошук нових методів управління структурою металів, так і створення перспективних ливарних технологій.

У другому розділі проведено узагальнення принципів методики побудови підсистеми комп'ютерного термічного аналізу для прогнозу стану металевих розплавів на основі алюмінію.

Визначено необхідну точність вимірювання температури сплавів за допомогою комп'ютерного термічного аналізу (КТА), яка при вимірюванні температури ліквідус для сплавів систем Al-Si, Al-Cu та Al-Mg складає 2,0 градусів у діапазоні температур 853–930 К, а роздільна здатність цифрового перетворювача повинна бути не менше, ніж 0,3 градуси. Частоту дискретизації визначили за результатами спектрального складу кривих охолодження, яка складає $F_{d \min} \geq 2$ Гц. Також визначено основні вимоги до конструкції відбірника доз металу:

Для системи КТА запропоновано безконтактний термошумовий датчик для вимірювання температури, який складається з контуру, що магнітно зв'язаний з металом, який досліджується, та з перетворювача напруги шуму у контурі. Розраховано передаточну характеристику датчика та максимальну величину шумів на виході вимірювального контуру, виконано оцінку

чутливості у динамічному діапазоні. Показано можливість безконтактного вимірювання температури рідкого та закристалізованого сплаву за допомогою термошумового термометра.

У третьому розділі наведено принципи математичної обробки кривих охолодження та розроблено математичні моделі, які застосовуються у підсистемі КТА інформаційно-технологічного комплексу для прогнозування структури і властивостей у литих виробах.

Розроблено математичні моделі, які пов'язують температуру проби металу з кількістю твердої фази у сплаві при кристалізації. Показано принципову можливість визначення кінетичних параметрів сплавів кристалізації за кривою охолодження. Зроблено уточнення математичної моделі кристалізації чистого металу, яку можна використовувати і для винятково евтектичних сплавів: Розроблені математичні моделі кристалізації подвійних сплавів, які утворюють твердий розчин, та сплавів з евтектикою.

У четвертому розділі наведено результати випробування підсистеми КТА, які показують доцільність її застосування в лабораторних та промислових умовах.

Показано, що за допомогою математичних моделей, які пов'язують параметри кристалізації, що визначаються за кривою охолодження із службовими характеристиками сплавів можна здійснювати прогноз властивостей ливарних сплавів. Створено алгоритм модифікованості прогнозу структури у литих алюмінієвих сплавах. Висунуто умови впровадження системи КТА у виробництво.

У п'ятому розділі розроблено імітаційну модель процесу структуроутворення при твердінні виливків, яка є алгоритмом, що враховує основні уявлення про кристалізацію металів та сплавів, а також реалізує клітинний автомат ймовірнісного типу.

На підставі аналізу кристалізації чистого металу або бінарного сплаву, виділено основні макрофізичні процеси, що визначають її хід: теплопередачу, що відбувається в об'ємі розплаву під впливом зовнішніх факторів, та дифузійний перерозподіл компонентів розплаву при формуванні твердого розчину. Площина моделі являє собою клітинний автомат, кожна комірка якого відповідає певній точці системи. Температура і концентрація другого компоненту у кожній точці розплаву визначають наявність і розмір локального переохолодження у ній. Переохолодження розраховується як різниця температури ліквідус і температури у даний момент часу у цій самій точці. За наявності переохолодження у будь якій точці системи, у цьому місці з'являються умови виникнення центру кристалізації або росту вже наявного кристалу. Ураховується, що утворення нового кристалу потребує більшої енергії, ніж зростання вже наявного. При переході розплаву у тверду фазу виділяється тепло кристалізації і змінюється концентрація другого компоненту навколо точки фазового перетворення.

Теплопередача в металі моделюється двомірним рівнянням теплопровідності Фур'є для прямокутної проби з додатковим нелінійним

членом, який враховує виділення (чи поглинання) теплоти при фазовому перетворенні. З усіх сторін системи встановлено граничні умови 3-го роду. Для визначення дифузії другого компонента у розплаві використовували двомірне рівняння Фіка. Граничні умови припускають відсутність міжфазового обміну на межах системи.

Для розрахунку кількості другого компоненту, що виділяється при фазовому перетворенні, вводяться характерні точки діаграми стану подвійного сплаву і виконується апроксимація ліній ліквідус і солідус.

Для розв'язку задач теплопровідності та дифузій використовували числовий метод кінцевих різниць та числову схему з розщепленням.

В моделі використовується алгоритм клітинного автомату, розроблений автором. Таким чином перше розроблена імітаційна модель процесу структуроутворення у бінарних сплавах при їх кристалізації з використанням клітинного автомату, робота якого керується зовнішніми умовами охолодження, вилівка. Експериментально доведена адекватність моделі. Показано, що фронт кристалізації моделювання твердіння чистого алюмінію не є плоским, а відповідає реальному процесу твердіння металів. При цьому можуть утворитися класична тризонна структура, зона транскристалізації або дисперсна структура у литому металі. В моделі передбачено врахування впливу модифікування та впливу стінок форми на структуру, яка формується при кристалізації.

У шостому розділі розроблено методику підготовки моделі для проведення обчислювального експерименту та представлено результати дослідження процесів структуроутворення у сплавах при їх кристалізації з допомогою імітаційного моделювання.

За допомогою імітаційної моделі, досліджено вплив швидкості охолодження вилівка на процес утворення центрів кристалізації у рідкому алюмінію та сплавах систем Al-Si та Al-Cu та на вид кривих охолодження. Також досліджено вплив швидкості охолодження на утворення центрів твердої фази у чистому алюмінії при наявності в ньому твердих частинок.

На прикладі кристалізації алюмінію за допомогою комп'ютерного експерименту, досліджено вплив зміни зовнішніх умов охолодження вилівка під час кристалізації на формування його структури. Це надає змогу в рамках комп'ютерного експерименту розробити методи управління процесом кристалізації для отримання необхідних властивостей литих виробів або уникнути зайвих витрат при реалізації реального експерименту, якщо кінцевий результат у ньому передбачений негативним.

в рамках комп'ютерного експерименту підтверджено адекватності формули для визначення критичного радіуса зародка кристалізації, яка розроблена автором.

Висновки належним чином відображають основні результати дисертаційної роботи.

Дисертаційна робота виконана на високому науковому рівні, її оформлення відповідає необхідним вимогам. Втім, по роботі можна зробити наступні зауваження:

1. На рис. 5.8 як один із параметрів налаштування моделі вказано "Коэф. пропорциональности", а в тексті він позначається як коефіцієнт адаптації (стор. 250) і не зовсім зрозуміле його пояснення.

2. На рис. 5.9 як один із параметрів налаштування моделі вказано "Диапазон концентраций сплава", а в тексті його пояснення відсутнє.

3. На рис. 5.10 не пояснені позиції 10 та 11. Там же не завершений останній рядок в підписі до рисунку.

4. Не зовсім зрозумілим є пункт 4 в підписі до рис. 5.11.

5. Виникає питання яким чином визначена розмірність коефіцієнта K_f в формулі (1.37) на стор. 87.

6. В розділі 1 в підпункті 1.4.2 порушено тему стосовно критерію термодинамічної нерівноважності систем але надалі в роботі ця проблема не підіймається.

Загальний висновок по дисертації. Оцінюючи дисертаційну роботу Донія О.М. в цілому слід зазначити, що подібні дослідження за своїм комплексом були проведені вперше. Робота по своїй суті закладає новий методичний підхід до розробки та удосконаленню технологій ливарного виробництва.

Дисертаційна робота Донія О.М. є завершеною науковою працею, містить одержані автором нові наукові та практичні результати в галузі ливарного виробництва, які в сукупності розв'язують актуальну задачу створення наукових основ і розроблення математичних та комп'ютерних моделей кристалізації сплавів з метою управління структурою і властивостями литого металу.

Робота повністю відповідає вимогам пунктів 9, 11 "Порядку присудження наукових степенів". Зміст дисертації відповідає формулі та напрямку досліджень паспорту спеціальності 05.16.04 – ливарне виробництво. Автор дисертації Доній Олександр Миколайович заслуговує присудження наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 05.16.04 – ливарне виробництво.

Офіційний опонент:

д.т.н., професор, проректор з наукової роботи та міжнародної діяльності
Національного університету
«Запорізька політехніка»



Наумик В. В.