

К.І. Узлов, А.В. Дзюбіна, Н.С. Романова, О.В. Мовчан
**ОБЧИСЛЕННЯ ТОЧНИХ ЗНАЧЕНЬ ТЕМПЕРАТУР
ФАЗОВИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ
МАТЕМАТИЧНОЇ ОБРОБКИ В ПАКЕТІ MATHCAD
ДАНИХ ДИФЕРЕНЦІЙНОГО ТЕРМІЧНОГО АНАЛІЗУ**

Анотація. Обчисленням даних диференційного термічного аналізу дослідного сплаву системи Cu–Sn–Si за допомогою математичного процесора MathCAD 14 в інтервалі температур 20 ... 624°C визначене положення точок перегинів та екстремуму. Коректні значення температур низькотемпературного (перегин), середньотемпературного (перегин) та високотемпературного (екстремум) твердофазних структурних перетворень в дослідному сплаві встановлені як: $T_X = 274.5^\circ\text{C}$, $T_Y = 368.25^\circ\text{C}$ та $T_Z = 507.5^\circ\text{C}$ з коефіцієнтами кореляції поліноміальної апроксимації: $r = 0.995$, $r = 0.995$ та $r = 0.978$, відповідно.

Ключові слова: апроксимація, екстремум, функція, перегин, кореляція, сплав системи Cu–Sn–Si.

Стан проблеми

Об'єктом дослідження наявної роботи був сплав системи Cu-Sn-Si для виготовлення дзвонів та елементів музичних інструментів ударного типу.

Традиційна дзвонова бронза це сплав міді із 20,0 ... 22,5% Sn (за масою) [1]. Звучання дзвонової бронзи насамперед залежить від рівня напруженого стану сплаву, тобто від вмісту у ньому інтерметалідної фази. У дзвоновій олов'яній бронзі інтерметалідною фазою є сполука Cu_3Sn_8 . Основним недоліком цієї бронзи є наявність у складі великої кількості коштовного олова.

Для зниження собівартості виробів автори [2, 3] запропонували бронзу складу (мас. %): мідь 78,00-80,00%, олово 8,00-10,00%, сурма 10,60-11,50%, свинець 0,08-0,16%. Такий сплав містить у два рази меншу кількість олова. Мікроструктура цієї бронзи є гетерогенною і, за даними [2], складається з α -твердого розчину та евтектоїду ($\alpha+\beta+\epsilon$).

дом пересичених твердих розчинів [11]. Але візуально ідентифікувати коректні температурні позиції цих перетворень неможливо.

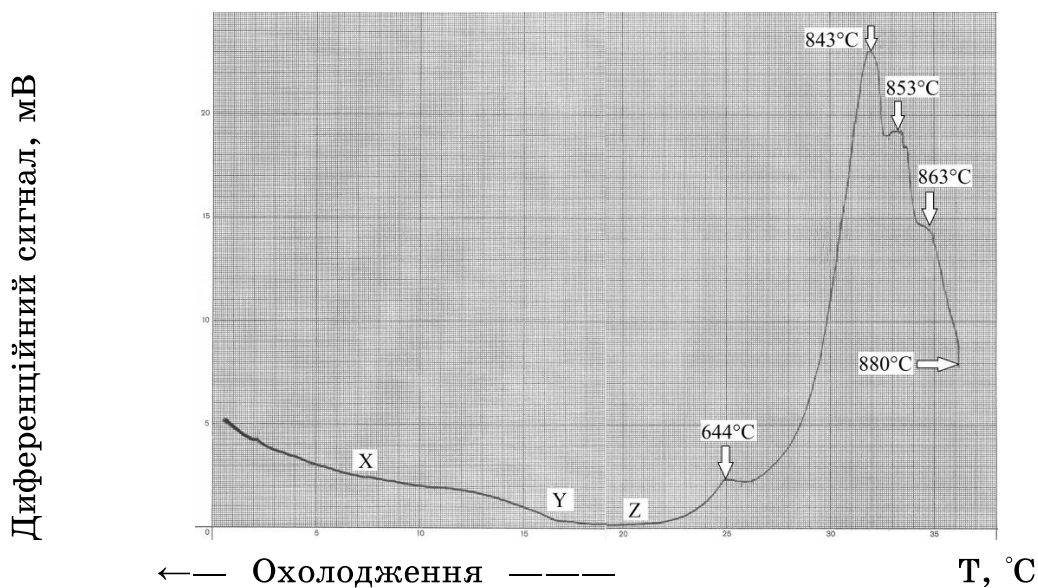


Рисунок 2 – Диференційна термограма процесу охолодження дослідного сплаву

Основні результати досліджень

Результати обробки експериментальних даних у пакеті MathCAD 14.

В роботі було здійснено математичне обчислення даних диференційного термічного аналізу за допомогою математичного процесора MathCAD 14. Для визначення температур перетворень експериментальну криву апроксимували поліномами у низько- та високо-температурних інтервалах: 124 ... 325°C, 175 ... 445°C та 420 ... 624°C. Подальший аналіз кожної поліноміальної залежності з точки зору наявності точок перегину та локальних екстремумів здійснювали за допомогою стандартних методики математичного аналізу та функцій MathCAD14 `regress ()`, `interp ()` [12].

Графічна презентація експериментальних даних залежності диференційного сигналу від температури при охолодженні представлена на рисунку 3.

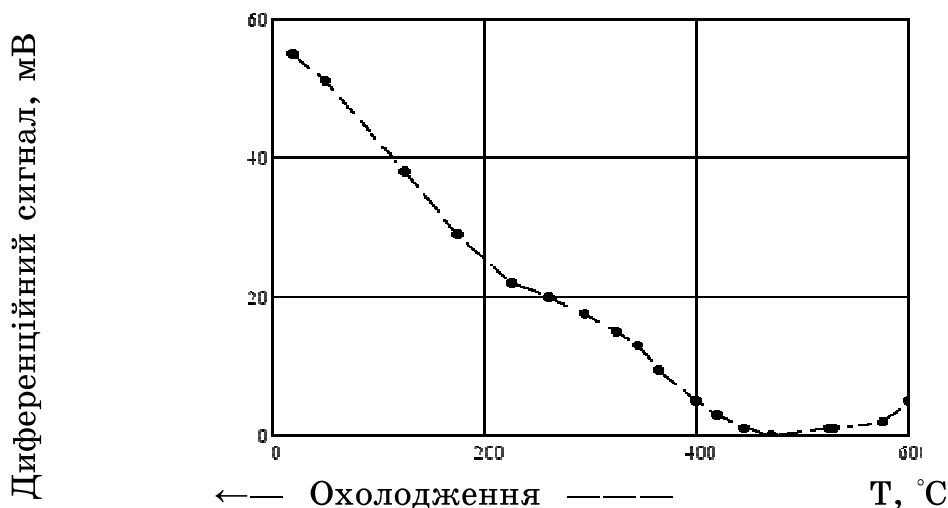


Рисунок 3 – Залежність експериментальних значень ДТА від температури охолодження в інтервалі 20...624⁰С

Вихідні дані результатів ДТА

Вихідні дані результатів ДТА представлені в Таблиці 1 у вигляді масиву «X», де колонка $X<0>$ - вектор значень температур (Т,°С), а колонка $X<1>$ - вектор значень диференційного сигналу (Y,мВ).

Таблиця 1

Вихідні дані результатів диференційного термічного аналізу

№з/п	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
$X<0>$	20	50	125	175	225	260	295	325	345	365	400	420	445	470	524	529	574	600	624
$X<1>$	55	51	38	29	22	20	17.5	15	13	9.5	5	3	1	0	1	1	2	5	10

Поліноміальна апроксимація експериментальних даних ДТА в температурному інтервалі 50 ... 365⁰С.

Вихідні дані цього інтервалу представлені у вигляді масиву X1. З використанням стандартної функції regress(), побудована математична модель термограми в інтервалі 50...365⁰С у вигляді поліному третього ступеню: $Y_{\text{розрах.}} = a_0 + a_1X + a_2X^2 + a_3X^3$, де a_i – коефіцієнти поліноміальної моделі; $Y_{\text{розрах.}}$ – вектор значень розрахованого диференційного сигналу на основі математичної моделі; X - вектор значень температур. Ступінь адекватності одержаної моделі оцінювалася за величиною коефіцієнту кореляції між експериментальними даними і даними, які одержані на основі побудованої моделі. Дані, які одержані на основі побудованої моделі розраховані з використанням функції interp(), а коефіцієнт кореляції – з використанням функції corr(). Результати розрахунків математичної моделі зведені у таблиці 2.

Як впливає зі значення коефіцієнту кореляції ($\text{corr}(X1^{(1)}, X1^{(2)}) = 0.995$ – таблиця 2), відносна похибка між експериментальними даними та даними, які одержані на основі поліноміальної моделі третього ступеню не перевищує 0.005%. Це свідчить про високу ступінь адекватності запропонованої моделі для апроксимації експериментальних даних у вказаному інтервалі температур.

Подальший математичний аналіз одержаної поліноміальної залежності на наявність точок перегину пов'язаний з побудовою рівняння похідної другого порядку та його роздільною здатністю відносно температури термічного ефекту. Ці графічні побудови і розрахунки, що були проведені з використанням функції $\text{root}()$, представлені на рисунках 4 та 5, де $f12(x)$ – друга похідна поліноміальної моделі по температурі.

Результат розрахунку: $\text{root}(f12(x), x, 200, 300) = 274.518$.

Таким чином, обчисленням даних диференційного термічного аналізу дослідного сплаву системи Cu–Sn–Si (Рисунок 3) за допомогою математичного процесора MathCAD 14 у низькотемпературному інтервалі 50...365°C визначене положення точки перегину, яке відповідає показнику 274.518. Тобто, значення температури низькотемпературного структурного перетворення (Рисунки 2, 5) в дослідному сплаві встановлене як: $T_X = 274.5^\circ\text{C}$.

Таблиця 2

Результати розрахунків математичної моделі термограми в інтервалі температур 50...365°C

$X1^{(0)}$ - вектор значень температур; $X1^{(1)}$ - вектор значень диференційного сигналу		
$X1 = \begin{pmatrix} 50 & 51 \\ 125 & 38 \\ 175 & 29 \\ 225 & 22 \\ 260 & 20 \\ 295 & 18 \\ 325 & 17 \\ 345 & 13 \\ 365 & 9 \end{pmatrix}$	$R := \text{regress}(X1^{(0)}, X1^{(1)}, 3)$ $R = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \\ 66.087 \\ -0.333 \\ 8.88 \times 10^{-4} \\ -1.078 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$	$a0=66.087$ $a1=-0.333$ $a2=8.88 \times 10^{-4}$ $a3=-1.078 \times 10^{-6}$ $f1(x) := \text{interp}(R, X1^{(0)}, X1^{(1)}, x)$, де $f1(x)$ - вектор значень Y розрах. , $X1^{(2)} = f(x)$
$\text{corr}(X1^{(1)}, X1^{(2)}) = 0.995$		

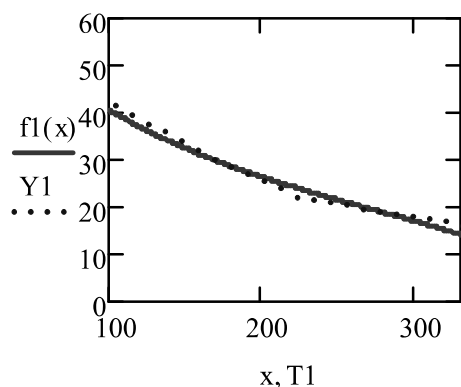


Рисунок 4 – Залежність експериментальних значень ДТА від температури охолодження в інтервалі 50...365⁰С

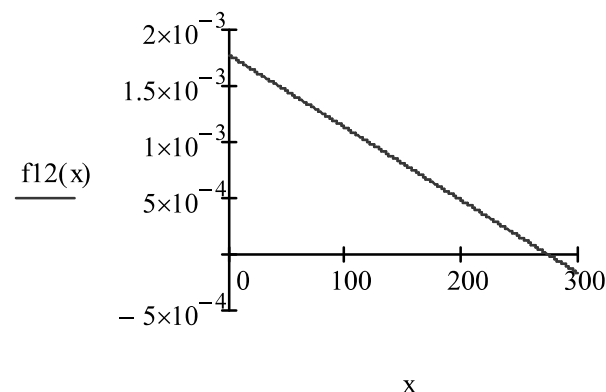


Рисунок 5 – Графік залежності другої похідної поліноміальної моделі від температури охолодження в інтервалі температур 50...365⁰С

Поліноміальна апроксимація експериментальних даних ДТА в температурному інтервалі 295 ... 470⁰С.

Вихідні дані цього інтервалу представлені у вигляді масиву X2. З використанням стандартної функції regress() побудована математична модель термограми в інтервалі 295 ... 4700С у вигляді поліному третього ступеню: $Y_{розрах.} = a_0 + a_1X + a_2X^2 + a_3X^3$. Результати розрахунків математичної моделі зведені у Таблиці 3.

Таблиця 3

Результати розрахунків математичної моделі термограми в інтервалі температур 295 ... 470⁰С

$X2^{(0)}$ - вектор значень температур, $X2^{(1)}$ - вектор значень диференційного сигналу		
$X2 = \begin{pmatrix} 295 & 18 \\ 325 & 17 \\ 345 & 13 \\ 365 & 9 \\ 420 & 3 \\ 445 & 1 \\ 470 & 0 \end{pmatrix}$	$R := \text{regress}(X2^{(0)}, X2^{(1)}, 3)$ $R = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \\ -213.492 \\ 2.118 \\ -6.16 \times 10^{-3} \\ 5.576 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$	$a_0 = -213.492$ $a_1 = 2.118$ $a_2 = -6.16 \times 10^{-3}$ $a_3 = 5.576 \times 10^{-6}$ $f2(x) := \text{interp}(R, X2^{(0)}, X2^{(1)}, x)$, де $f2(x)$ - вектор значень $Y_{розрах.}$, $X2^{(2)} = f(x)$
$\text{corr}(X2^{(1)}, X2^{(2)}) = 0.995$		

Як впливає зі значення коефіцієнту кореляції ($\text{corr}(X2^{(1)}, X2^{(2)}) = 0.995$ – таблиця 3), відносна похибка між експериментальними даними та даними, які одержані на основі поліноміальної моделі третього ступеню не перевищує 0.005%. Це свідчить про високу ступінь адекватності запропонованої моделі для апроксимації експериментальних даних у вказаному інтервалі температур.

Результати математичного аналізу на наявність точки перегину представлені на рисунках 6 та 7, де $f22(x)$ – друга похідна поліноміальної моделі по температурі.

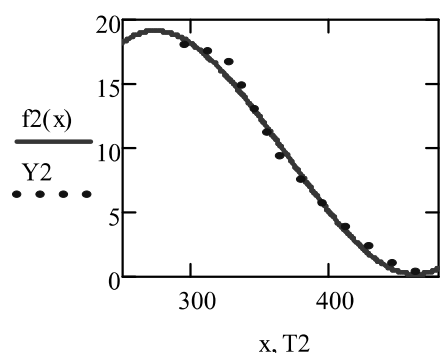


Рисунок 6 – Залежність експериментальних значень ДТА від температури охолодження в інтервалі 295...470⁰С

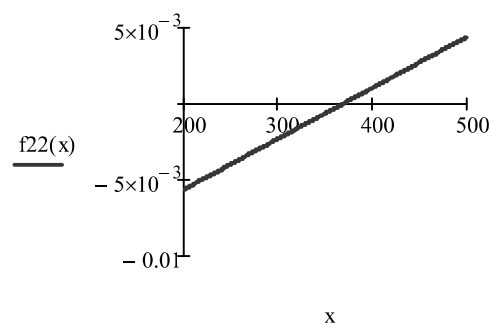


Рисунок 7 – Графік залежності другої похідної поліноміальної моделі від температури охолодження в інтервалі температур 295...470⁰С

Поліноміальна апроксимація експериментальних даних ДТА в температурному інтервалі 420 ... 624⁰С

Вихідні дані цього інтервалу представлені у вигляді масиву X3. З використанням стандартної функції regress() побудована математична модель термограми в інтервалі 420 ... 624⁰С у вигляді поліному третього ступеню: $Y_{\text{розрах.}} = a_0 + a_1X + a_2X^2 + a_3X^3$. Результати розрахунків математичної моделі зведені у Таблиці 4.

Як впливає зі значення коефіцієнту кореляції ($\text{corr}(X3^{(1)}, X3^{(2)}) = 0.978$ – таблиця 4), відносна похибка між експериментальними даними та даними, які одержані на основі поліноміальної моделі третього ступеню не перевищує 0.022%. Це свідчить про високу ступінь адекватності запропонованої моделі для апроксимації експериментальних даних у вказаному інтервалі температур.

Результати математичного аналізу на наявність екстремуму представлені на Рисунках 8 та 9, де $f31(x)$ – перша похідна поліноміальної моделі по температурі.

Результат розрахунку: $\text{root}(f31(x), x, 500, 520) = 507.512$.

Таким чином, обчисленням даних диференційного термічного аналізу дослідного сплаву системи Cu–Sn–Si (Рисунок 3) за допомогою математичного процесора MathCAD 14 у високотемпературному інтервалі 420 ... 6240С визначене положення точки екстремуму, яке відповідає показнику 507.512. Тобто, значення температури високотемпературного структурного перетворення (рисунки 2, 9) в дослідному сплаві встановлене як: $TZ = 507.5^\circ\text{C}$.

Таблиця 4

Результати розрахунків математичної моделі термограми в інтервалі температур 420 ... 624°С

$X3^{(0)}$ - вектор значень температур, $X3^{(1)}$ - вектор значень диференційного сигналу		
$X3 = \begin{pmatrix} 420 & 3 \\ 445 & 1 \\ 470 & 0 \\ 524 & 1 \\ 529 & 1 \\ 574 & 2 \\ 600 & 5 \\ 624 & 10 \end{pmatrix}$	$R := \text{regress}(X3^{(0)}, X3^{(1)}, 3)$ $R = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \\ -113.134 \\ 0.913 \\ -2.281 \times 10^{-3} \\ 1.814 \times 10^{-6} \end{pmatrix}$	$a0 = -113.134$ $a1 = 0.913$ $a2 = -2.26 \times 10^{-3}$ $a3 = 1.814 \times 10^{-6}$ $f3(x) := \text{interp}(R, X3^{(0)}, X3^{(1)}, x)$, де $f3(x)$ - вектор значень Урозрах., $X3^{(2)} = f(x)$
$\text{corr}(X3^{(1)}, X3^{(2)}) = 0.978$		

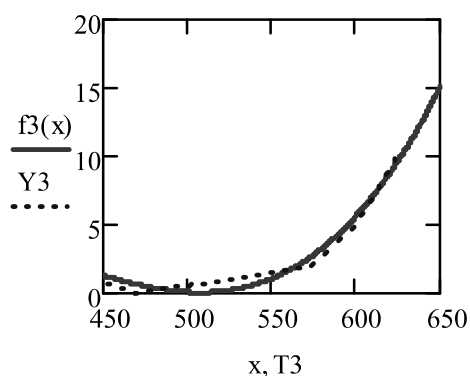


Рисунок 8 – Залежність експериментальних значень ДТА від температури охолодження в інтервалі 420...624°С

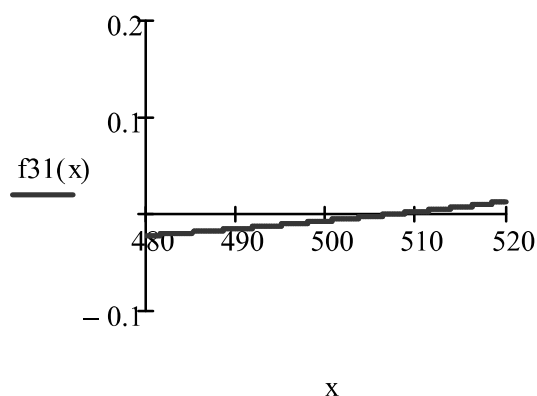


Рисунок 9 - Графік залежності першої похідної поліноміальної моделі від температури охолодження в інтервалі температур 420...624°С

Висновки

1. Обчисленням даних диференційного термічного аналізу дослідного сплаву системи Cu–Sn–Si за допомогою математичного процесора MathCAD 14 в інтервалі температур 20 ... 624°C визначене положення точок перегинів та екстремуму на експериментальній кривій диференційного термічного аналізу в області твердофазних перетворень.

2. Коректне значення температури низькотемпературного структурного перетворення (перегин) в дослідному сплаві встановлене як $T_X = 274.5^\circ\text{C}$ з коефіцієнтом кореляції поліноміальної апроксимації $r = 0.995$.

3. Коректне значення температури середньотемпературного структурного перетворення (перегин) в дослідному сплаві встановлене як $T_Y = 368.25^\circ\text{C}$ з коефіцієнтом кореляції поліноміальної апроксимації $r = 0.995$.

4. Коректне значення температури високотемпературного структурного перетворення (екстремум) в дослідному сплаві встановлене як $T_Z = 507.5^\circ\text{C}$ з коефіцієнтом кореляції поліноміальної апроксимації $r = 0.978$.

ЛІТЕРАТУРА

1. Богуслаев В.О. Ливарні властивості металів і сплавів для прецизійного литва / В.О. Богуслаев, С.І. Реп'ях, В.Г. Могилатенко та ін. – Запоріжжя: АТ «МОТОР СІЧ», 2016. – 474 с.

2. Лисовский В.А. Экономнолегированные колокольные бронзы с повышенными характеристиками механических свойств / В.А. Лисовский, О.Б. Лисовская, Л.П. Кочеткова, Ю.К. Фастов // *Металловедение и термическая обработка металлов*, 2007. - №5 (623). - С. 23 - 25.

3. Пат. 2265894 РФ, МПК7 G10K, 1/00. Патентообладатель - Вятский государственный университет (ВятГУ) (RU). Материал для изготовления колоколов и звучащих элементов ударных музыкальных инструментов / О.Б. Лисовская, В.А. Лисовский, заявл. 07.07.04; опубл. 10.12.05 // Бюл.2005. №34. С.4.

4. Двойные и многокомпонентные системы на основе меди / Под ред. С.В. Шухардина. – М.: Наука, 1979. – 249 с.

5. Лякишев Н.П. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник в 3-х томах / Н.П. Лякишев. – М.: Машиностроение, 1996..

6. Двойные и многокомпонентные системы на основе меди: Справочник / Под ред. М. Е. Дрица. - М.: Наука. - 1979. - 246 с.

7. Хансен М. Структура двойных сплавов / М. Хансен, К. Андерко. - М.: Металлургиздат. - 1962. - Т. 1 - 608 с.

8. Хансен М. Структура двойных сплавов / М. Хансен, К. Андерко. - М.: Металлургиздат. - 1962. - Т. 2 - С. 613 - 1488.

9. ASM Metals Handbook. Volume 03: Alloy Phase Diagrams / ASM International. Режим доступу:

http://www.asminternational.org/search/-/journal_content/56/10192/25871543/PUBLICATION

10. Приборы и методы физического металловедения В двух томах/ под ред. Ф. Вейнберга. – М.: Мир. – 1973.

11. Древинг В.П. Правило фаз / В.П. Древинг. – М.: Издательство МГУ, 1954. – 173 с.

12. Очков В. Ф. MathCAD 14 для студентов, инженеров и конструкторов / В. Ф. Очков. — СПб.: БХВ-Петербург, 2007. — 368 с.