

## Програмні засоби оптимального вибору матеріалів

О.В.Степанов, кандидат технічних наук

Ю.І.Богомол, кандидат технічних наук

Національний технічний університет України «КПІ» ім. Ігоря Сікорського

*Розглянуто можливості систем комп'ютерно орієнтованого вибору матеріалів на прикладі CES Edupack. Показано перспективність застосування програмних засобів оптимального вибору матеріалів для сфери освіти з матеріалознавчих та машинобудівних спеціальностей, наукових досліджень, проектування виробів.*

Сьогоднішній день, темпи та тенденції розвитку техніки вимагають застосування сучасних матеріалів, оптимізації їх властивостей та значного скорочення часу від одержання матеріалу до його впровадження у виробництво. Суттєву роль у вирішенні цих проблем може відіграти інформатизація матеріалознавства – максимально широке застосування комп'ютерних технологій для накопичення та оброблення інформації про властивості матеріалів, а також комп'ютерно асистована інтеграція проектування виробів та матеріалів [1].

За останні десятиліття з'явилося декілька напрямів такої інтеграції:

1. Вибір матеріалів з використанням алгоритмів пошуку, аналізу та оптимізації за заданими критеріями в широкому спектрі баз даних, що передбачає одержання найкращої комбінації індексів властивостей матеріалів, для реалізації заданих службових характеристик. Такий підхід опирається перш за все на одержання та обробку даних, засоби візуалізації та забезпечення продуктивного інтерфейсу розробнику для підтримки вибору матеріалів.

2. Підхід в проектуванні, що базується на імітаційному та розрахунковому моделюванні для прискореної розробки нових матеріалів знизу-вгору (від кристалічної та мікроструктури до властивостей матеріалу на макро рівні), що комбінується з інформатикою матеріалів.

3. Підхід, що передбачає суттєву інтеграцію інформації баз даних та інструментів математичного і імітаційного моделювання, а також оптимізацію та конкурентне проектування для виробництва, що одержало назву Інтегроване Обчислювальне Проектування Матеріалів (Integrated Computational Materials Engineering (ICME)) [2].

Перший підхід знайшов свою реалізацію у вигляді систем доступу до баз даних різних за реалізацією та ліцензуванням, серед яких виділяється система CES (Cambridge Engineering Selector) розроблена фірмою Granta Design. В рамках виконання міжнародного освітнього проекту "Tempus

ММАТЕНГ” Інженерно-фізичний факультет Національного технічного університету України “Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського” одержав ліцензію на використання пакету CES Edupack в навчальному процесі та науковій діяльності.

Пакет CES Edupack реалізовано у вигляді програми управління базою даних, яка забезпечує формування запитів як до окремих таблиць так і до їх комбінацій, аналіз результатів та формулювання звітів, в тому числі в графічній формі.

База даних сформована як система пов’язаних таблиць, схему якої показано на рис. 1. Ядро системи складають таблиці матеріалів (Material Universe) та процесів (Process Universe), які мають розгалужену структуру. Решта таблиць носить, переважно, довідковий характер.

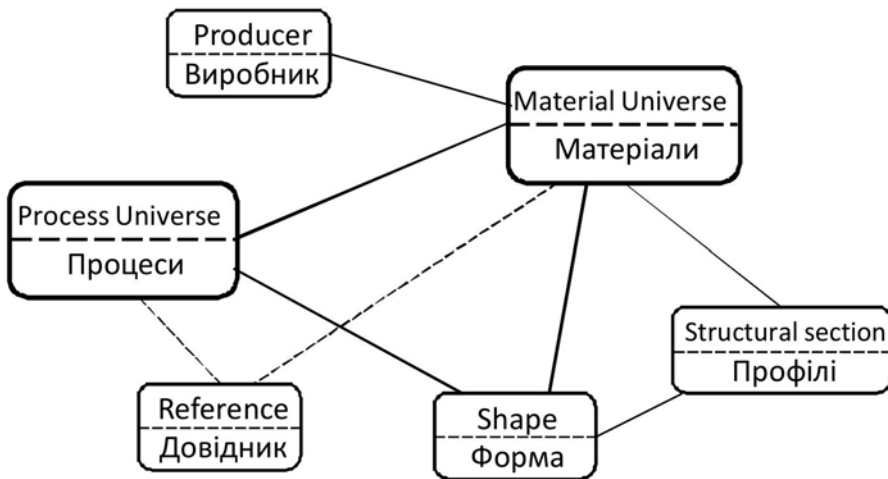


Рис. 1. Схема зв'язку таблиць бази даних CES Edupack.

Таблиця “Матеріали” містить більше трьох тисяч матеріалів, об’єднаних у 5 сімейств: скло та кераміка, метали та сплави, полімерні матеріали, волокна та частинки, гібридні матеріали. Кожне сімейство має власну ієрархію і містить властиву йому кількість матеріалів. Так, наприклад, підрозділ “чорні метали” сімейства метали та сплави містить більше 560 індивідуальних матеріалів.

Таблиця “Процеси” містить близько 250 процесів трьох класів: формоутворюючі, процеси з’єднання та процеси поверхневого оброблення. Записи процесів пов’язані з записами матеріалів, забезпечуючи можливість зв’язаного вибору.

Структура бази даних та логіка роботи програмної оболонки логічно слідує з робіт Майкла Ешбі (Michael Ashby) [3,4], в яких також розроблено ряд методик оптимізації вибору матеріалів, процесів чи їх поєднань. Серед іншого запропоновано методики оптимального вибору матеріалів за наявності обмежень, за наявності конфлікту обмежень та багатокритеріальної оптимізації.

Процес вибору методично розділяють на кроки:

## Технічна інформація

– трансляції – переведення вимог до функціональних властивостей виробу у визначені числові значення характеристик матеріалу, виділення обмежень та критерію оптимізації;

– відсіювання – вилучення з розгляду матеріалів, які не відповідають обов'язковим вимогам, визначеним на етапі трансляції;

– оптимізація – ранжування матеріалів, що відповідають вимогам за числовими значеннями критерію оптимізації, та вибір групи матеріалів з

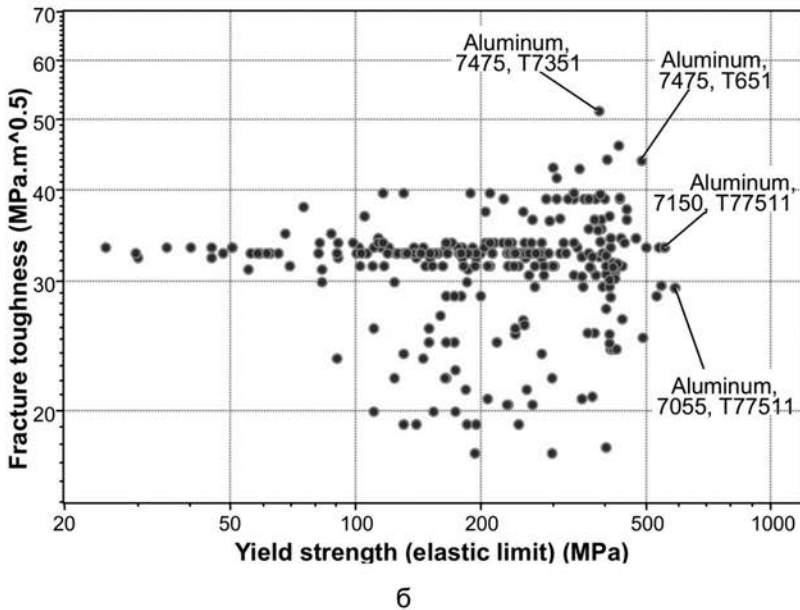
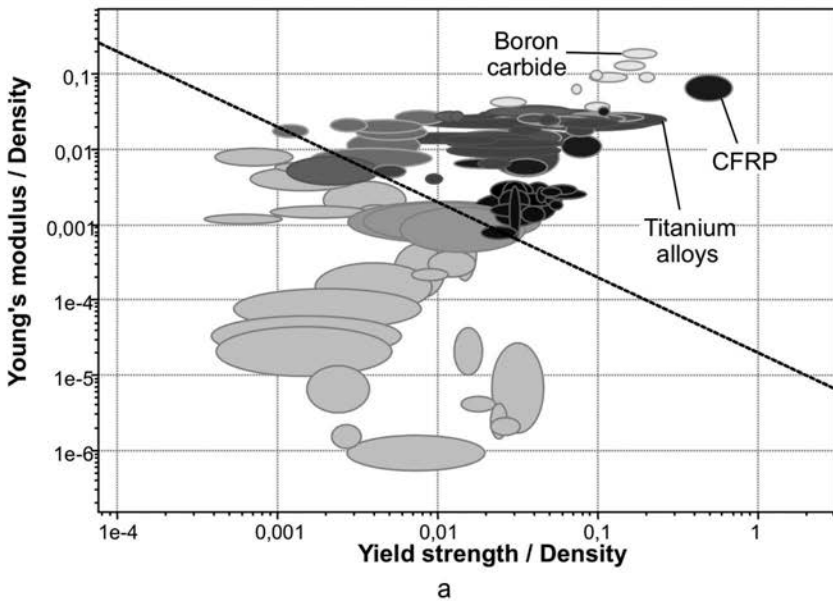


Рис. 2. Графіки властивість-властивість в системі CES Edupack. а – зв'язок питомого модуля пружності з питомою міцністю для матеріалів різних класів, б – зв'язок тріщиностійкості з міцністю (межа плинності) для алюмінієвих сплавів.

найкращими значеннями критерію для документування та заключного вибору.

Програмно застосовується три інструменти: Limit – явне вказування числових значень необхідних характеристик матеріалів: механічних, електричних, теплових, вартісних, тощо; Tree – вибір частини таблиць бази даних, які необхідно включити до розгляду; Chart – графічне відображення обраних властивостей матеріалів.

Графічні зображення являються ключовими в процесів вибору з декількох причин. По-перше: в графічному режимі можна виконувати як етап відсіювання так і етап оптимізації. По-друге візуалізація характеристик матеріалів суттєво спрощує їх відносне порівняння і вибір не окремого матеріалу, а їх груп. Двокоординатні графіки властивість-властивість в ряді публікацій носять назву графіків Ешбі (Ashby chart). На рис.2 показано традиційний для CES вигляд графіків. Графіки, звичайно, доповнюються засобами вибору типу градієнтної лінії (показана на рис.2 а).

Таким чином використання комп'ютерних систем вибору матеріалів дозволяє: студентам матеріалознавчих спеціальностей – сформулювати системний підхід до розв'язання прикладних задач з досягненням оптимального результату; дослідникам – оперативно позиціонувати власні розробки серед відомих аналогів та визначати шляхи подальшого вдосконалення матеріалів; конструкторам – обирати матеріал на етапі первинного дизайну виробів і, тим самим, вдосконалювати процес конструювання.

## Література

1. Jitesh H. Panchal , Surya R. Kalidindi, David L. McDowell. Key computational modeling issues in Integrated ComputationalMaterials Engineering // Computer-Aided Design. – 2013. – Vol. 45. – P. 4 – 25.
2. Integrated design of multiscale, multifunctional materials and products. David L. McDowell, Jitesh H. Panchal, Hae-Jin Choi, Carolyn Conner Seepersad, Janet K. Allen and Farrokh Mistree. Elsevier, 2010. – 360 p.
3. Michael Ashby, Hugh Shercliff, David Cebon. Materials. Engineering, Science, Processing and Design. Elsevier; 2007. – 514 p.
4. Michael Ashby. Materials Selection in Mechanical Design. Elsevier; 2011. – 646 p.

## References

1. Jitesh H. Panchal , Surya R. Kalidindi, David L. McDowell (2013). Key computational modeling issues in Integrated ComputationalMaterials Engineering. *Computer-Aided Design*. Vol. 45, p.4 – 25. [in English]
2. David L. McDowell et all. (2010). Integrated design of multiscale, multifunctional materials and products. Elsevier. 360 p. ISBN: 978-1-85617-662-0. [in English]
3. Michael Ashby et all. (2007). Materials. Engineering, Science, Processing and Design. Elsevier. – 514 p. [in English]
4. Michael Ashby (2011). Materials Selection in Mechanical Design. Elsevier. 646 p. [in English]

О. В. Степанов, Ю. И. Богомол

**Программные средства оптимального выбора материалов**

**Резюме**

Рассмотрены возможности систем компьютерно ориентированного выбора материалов на примере CES Edupack. Показана перспективность применения программных средств оптимального выбора материалов для сфер образования по материаловедческим и машиностроительным специальностям, научных исследований, проектирования изделий.

O. V. Stepanov, Yu. I. Bogomol

**Software for the optimal materials selection**

**Summary**

Capabilities of computer-aided systems for the optimal material selection, as example CES Edupack, were reviewed. Prospects of application of the software for optimal materials selection was shown for the material science and engineering specialties education, scientific research and products design.

***Шановні колеги!***

**Триває передплата на науково-технічний журнал  
«Металознавство та обробка металів» на 2017 р.**

Для регулярного одержання журналу потрібно перерахувати вартість заказаних номерів на розрахунковий рахунок Фізико-технологічного інституту металів та сплавів НАН України.  
Вартість одного номера журналу – 40 грн., передплата на рік – 160 грн.

Ціна архівних номерів 1995 – 2015 рр. – 10 грн.

**Розрахунковий рахунок для передплатників,  
спонсорів і рекламодавців:**

*банк ДКСУ в м. Києві, р/р 31257293112215, код банку 820172*

*Отримувач – ФТІМС НАН України, код ЄДРПОУ 05417153,*

*з посиланням на журнал "ММ".*

Копію документа передплати та відомості про передплатника

**просимо надсилати до редакції,**

**вказавши номер і дату платіжного документа.**