

О.С.НУРГАЯНОВА, А.А.ГАНЕЕВ**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВЛИЯНИЯ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ЖАРОПРОЧНОСТЬ
НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ С МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ**

Рассматриваются вопросы автоматизации проектирования жаропрочных никелевых сплавов с улучшенными физико-механическими свойствами. Предлагается методика моделирования зависимостей «состав-свойство», приводится оценка ее эффективности. *Жаропрочный сплав; математическое моделирование; зависимость «состав-свойство» автоматизированное проектирование сплавов*

ВВЕДЕНИЕ

Жаропрочные никелевые сплавы представляют собой сложную систему, имеющую многофазную структуру и сложный механизм легирования. Современные же никелевые литейные жаропрочные сплавы уже не удовлетворяют требованиям, предъявляемым к двигателям нового поколения. Поэтому вопросы разработки новых высокожаропрочных сплавов на сегодняшний день являются весьма актуальными.

1. СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА

Существующие методы поиска состава новых сплавов с требуемыми свойствами, основанные на эмпирическом опыте, являются весьма трудоемкими и включают многократные выплавки опытных образцов с последующим испытанием их на механические свойства и математической обработкой результатов. Из-за сложного характера изменения свойств материала в зависимости от химического состава, режимов термической обработки и условий испытаний, с ростом данных экспериментов возможность подобрать точную математическую зависимость между составом и свойствами быстро понижается и может стать невыполнимой, вследствие чего наиболее перспективные сплавы могут оказаться за пределами исследовательских возможностей. Зачастую в выборе нужных композиционных сплавов для работы приходится руководствоваться чутьем исследователя, кроме того, необходимо затрачивать огромные средства на исходные дефицитные материалы, дорогостоящее оборудование и проведение большого числа плавов и тестовых испытаний. Эти затраты чаще всего не окупаются результатами поиска, поглощая большие ресурсы времени и средств и принося все более скромные результаты.

С другой стороны, необходимо отметить, что в последние годы развитие информационных технологий происходило под влиянием не столько традиционных задач, порождаемых потребностями точных наук (физика, механика, и т.п.), сколько задач, характерных для сферы промышленного производства и бизнеса. Основу всех этих задач составляет работа с обширными массивами данных (численных, текстовых, графических), включая организацию их хране-

ния и обработки. При этом все чаще используются появившиеся в последние годы средства интеллектуального анализа данных, дополняющие или заменяющие средства традиционной статистики и нацеленные на поиск закономерностей, то есть, выявление знаний, скрытых в сырых (необработанных) данных [1-4]. Ориентация информационных технологий на решение проблем из этой области стимулировала активное внедрение алгоритмов решения плохо формализуемых задач [1], в противовес традиционным методам хорошо алгоритмируемых задач, с которых начиналось развитие вычислительной математики, нацеленной на решение задач физики, механики и т. п. Накопленный в последние годы опыт показывает, что плохо формализуемые задачи лежат в основе множества научных дисциплин. Основные особенности этих задач в том, что неизвестны аналитические зависимости или цепочки действий, приводящие к приемлемому результату, а исходные данные отличаются неполнотой, противоречивостью и искажениями.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Методика синтеза сплавов методами математического моделирования заключается непосредственно в разработке самих математических моделей влияния легирующих элементов на жаропрочность.

С точки зрения построения математических моделей «состав-свойство» был рассмотрен ряд методов – это методы распознавания образов, множественного регрессионного анализа (МРА) и интеллектуальные методы – метод группового учета аргументов (МГУА) и искусственных нейронных сетей (ИНС).

Методы распознавания образов эффективны лишь на первоначальном этапе исследования – когда есть необходимость группировки данных по какому-то признаку, например, в методе группового учета аргументов при формировании обучающей и контрольной выборок, где сплавы с максимальными свойствами используются для проверки модели на заключительном этапе алгоритма.

Метод множественной регрессии позволяет оценить влияние легирующих элементов по отдельности, что оказывается полезным при формировании

моделей более сложными интеллектуальными методами, каковыми являются МГУА и ИНС.

Таким образом, для решения данной задачи наиболее подходящими методами являются МРА и эвристики, которые требуют систематизированной исходной информации.

Вследствие этого возникает необходимость разработки специализированной базы данных по жаропрочным никелевым сплавам с монокристаллической структурой. На рис. 1 представлена общая методика синтеза сплавов на основе методов математического моделирования.

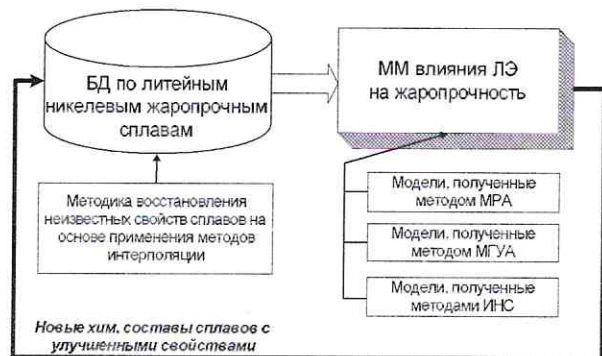


Рис. 1. Общая методика синтеза сплавов на основе методов математического моделирования

Разработка базы велась при помощи СУБД Paradox в среде программирования Delphi 6. База содержит сведения о химическом составе и физико-механических свойствах: 100- и 1000-часовых значениях жаропрочности в диапазоне температур от 750 до 1200°C, плотности, электронной концентрации, области применения и методах изготовления жаропрочных никелевых сплавов с монокристаллической структурой, также есть ссылки на страну-изготовителя, литературный источник и т. п. Была разработана нормализованная структура БД, состоящая из 7 таблиц и интерфейс доступа к ней.

В силу того, что у отечественных и зарубежных производителей значения жаропрочности приводятся при различных температурах, что обуславливается различными методами анализа сплавов, выборки сплавов по значению жаропрочности при различных температурах получают небольшие и неrepresentative. Наличие таких выборок существенным образом будет отражаться на прогнозируемых составах и свойствах сплавов, поскольку неустойчивость (разброс) любого прогноза на узком участке является показателем его невысокой достоверности.

В свете перечисленных недостатков представления информации возникает необходимость наполнения базы данных значениями жаропрочностей при температурах, по которым отсутствует информация в первоисточниках. Так, если у сплава известны значения жаропрочности при температурах 900 и 1000°C, то можно проинтерполировать значение жаропрочности при 926, 950 и 982°C. Анализ методов интерполяции (линейная, полиномы Эрмита, Лагранжа, Ньютона, Стирлинга, Бесселя, Эверетта,

сплайны) и проведенные вычислительные эксперименты показали, что наиболее эффективным и достоверным методом интерполяции является метод на основе случайных функций, который по сравнению со сплайн-интерполяцией свободен от проблемы выбора узлов и разбиения на группы в случае иррегулярных данных. Для формального выбора лучшего метода интерполяции был сформулирован критерий оптимальности: лучшим считался тот метод, которому соответствовало минимальное значение СКО из рассматриваемых значений, соответствующих выборкам с наибольшими относительными отклонениями по каждому методу:

$$i_{opt} = \arg \min_i \max_j S_{V_{n_i}}^{\%}$$

Проведение интерполяции позволило достичь увеличения исходной выборки на 16,3%. рис. 2.

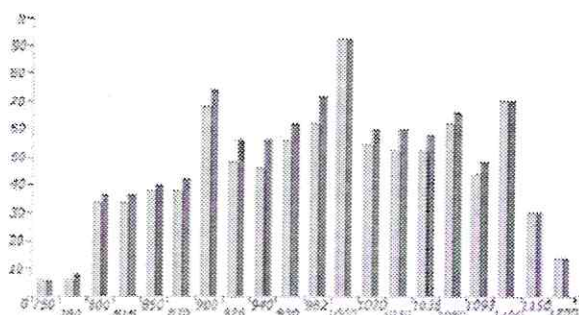


Рис. 2. Распределение числа сплавов по температурам до и после (светлый и темный цвет соответственно) проведения интерполяции, T – рабочая температура, N – количество сплавов

Представление сведений по жаропрочным сплавам в систематизированном виде и полнота соответствующей информации по свойствам позволяют сформулировать математическую постановку задачи синтеза сплавов.

Задача состоит в том, чтобы по имеющемуся массиву данных (база данных по жаропрочным сплавам) представляющему собой сведения о химическом составе жаропрочных сплавов, т.е. ряд наблюдений (x_1, x_2, \dots, x_m) , каждому из которых соответствует значение целевой функции – жаропрочности (y_1, y_2, \dots, y_m) , где $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$ – состав сплава i . Необходимо получить математическую зависимость, адекватно отражающую влияние легирующих элементов на жаропрочность, т.е. в общем случае необходимо решить задачу аппроксимации. Каждый промышленный сплав описывается набором признаков. Массив исходных данных представлен в виде матрицы $(m*n)$, где m – число объектов-сплавов, n – число признаков-компонентов:

$$x_{ij} = \begin{pmatrix} x_{11} x_{12} & x_{1n} \\ x_{21} x_{22} & x_{2n} \\ \vdots & \vdots \\ x_{m1} x_{m2} & x_{mn} \end{pmatrix}$$

Таблица 1

Результаты анализа регрессионных моделей

№ модели	Множественный коэффициент корреляции R	Коэффициент детерминации R^2
1	0,98	0,97
2	0,88	0,77
3	0,94	0,89
4	0,95	0,91
5	0,93	0,87

Построение точной математической модели изучаемого объекта – жаропрочного сплава весьма затруднительно, поэтому решение задачи отыскивается на базе собранного эмпирического материала из эвристических соображений. Таким образом, требуется:

1. До экспериментального определения жаропрочности научиться отличать сплавы с высокой жаропрочностью от сплавов с низкой жаропрочностью, пользуясь информацией о признаках. Опираясь с выделенными группами сплавов, компактно расположенными в пространстве признаков, оценить связь "структура-свойство".

2. Построить математическую модель влияния химического состава на свойство жаропрочного сплава.

3. Используя полученную математическую модель, синтезировать новый жаропрочный сплав с высокими свойствами [7, 8].

Итак, на основе проведенного анализа для решения данной задачи, выбор был сделан в пользу методов МРА, МГУА и метода многомерных ортогональных нормированных сплайнов, в основе которого лежит концепция ИНС.

3. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

При проведении множественного регрессионного анализа были получены следующие линейные модели многофакторной регрессии для 100-часовой жаропрочности при 800°C, 900°C, 1000°C, 1050°C, 1100°C (в скобках указаны элементы, не вошедшие в модель, но присутствующие в массиве исходных данных):

$$1) \sigma^{800} = 255,6 Ni - 1148,67 V + 1172,69 Hf - 232,6 Ta + 1538,27 Nb - 1358,27 Al - 199,65 Ti - 460,33 W - 1015,89 Mo - 28,34 Co + 188,47 Cr - 3938,4 (C, B, Zr)$$

$$2) \sigma^{900} = 1190,21 Ni + 1216,715 Re + 1168,43 V + 1152,49 Hf + 1578,74 Zr + 1196,01 Ta - 1187,25 Nb + 1179,39 Al + 1178,38 Ti + 1198,15 W + 1210,097 Mo + 1198,22 Co + 1201,15 Cr + 883,49 C - 118766 (B)$$

$$3) \sigma^{1000} = 86,14 Ni + 86,64 Ir + 96,96 Re + 58,08 V + 46,95 Hf + 469,7 Zr + 88,03 Ta + 73,51 Nb + 77,26 Al + 78,78 Ti + 87,86 W + 89,8 Mo + 87,56 Co + 81,64 Cr - 39,73 C - 8335,25 (B)$$

$$4) \sigma^{1050} = -531,9 Ni - 532,42 Ir - 524,07 Re - 533,14 V - 569,68 Hf - 129,63 Zr - 529,25 Ta - 554,22 Nb - 535,15 Al - 522,48 Ti - 527,78 W - 529,15 Mo - 531,64 Co - 537,35 Cr - 624,67 C + 53350,6 (B)$$

$$5) \sigma^{1100} = 260,22 Ni + 257,43 Ir + 272,99 Re + 289,88 V + 257,07 Hf + 134,36 Zr + 2621,2 Ta + 256,34 Nb + 264,9 Al + 249,77 Ti + 266,63 W + 267,87 Mo + 258,84 Co + 265,9 Cr + 105,7 C - 26031,59 (B)$$

Проверка данных регрессионных моделей на адекватность показала следующие результаты (Табл. 1):

Несмотря на то, что у модели 1 показатели адекватности – $R=0,98$, $R^2=0,97$ самые наилучшие, однако, данную модель хорошей считать нельзя, поскольку смоделировать влияние на жаропрочность элементов, образующих интерметаллидные соединения типа Ni_3Nb , $Ni_3(Al, Ti)$, $Ni_3(Al, Ta)$, $Ni_3(Al, Ti, Nb)$ и т. д. невозможно.

Из вышеизложенного видно, что модели, полученные классическими методами регрессионного анализа, даже если они по статистическим характеристикам являются значимыми, мало пригодны для целей прогнозирования свойства [5, 6].

Следующий метод, использованный для получения математической зависимости – метод группового учета аргументов (МГУА), который при осуществлении некоторых модификаций и адаптации, позволяет строить математические модели, оптимальные по критерию краткосрочного прогноза значений жаропрочности для новых сплавов.

Алгоритмы МГУА являются чрезвычайно помехоустойчивыми — при соотношении помеха/сигнал $\theta = 20-30\%$ алгоритмы позволяют получить точную физическую модель; не теряют работоспособности вплоть до соотношения $\theta = 300-400\%$. В этой области алгоритм находит модели для краткосрочного прогнозирования; и только при отношении помеха/сигнал, большем 400%, алгоритмы МГУА полностью теряют свою пригодность для моделирования [3].

Схема применения алгоритма МГУА с использованием частных описаний квадратичного типа и критерием селекции

$$\epsilon_k = \frac{1}{N_{np}} \sum_{i=1}^{N_{np}} (Y_i - Y_{ki})^2$$

следующая:

Шаг 1. Из множества выходов $X=(X_1, X_2, \dots, X_n)$ выбираются пары аргументов (X_i, X_j) , и составляются частные описания вида

$$Y_k^{(1)} = \varphi(X_i, X_j), i \neq j, i, j = 1, \dots, N$$

при этом используют частные описания квадратичного типа:

$$Y_k^{(1)} = a_0 + a_i X_i + a_j X_j + a_{ij} X_i X_j + a_{ii} X_i^2 + a_{jj} X_j^2$$

Число частных описаний 1-го ряда равно $M=n(n-1)/2$.

Шаг 2. Используя метод наименьших квадратов (МНК) для каждого описания находятся по обучаю-

щей выборке оценки неизвестных коэффициентов $a_0, a_i, a_j, a_{ij}, a_{ii}, a_{jj}$.

Шаг 3. По критерию минимума $\bar{\varepsilon}^2$ на проверочной последовательности отбирается F_1 лучших F_1 моделей, т.е. реализуется процедура селекции. Выходы этих моделей служат аргументами-входами для конструирования моделей второго ряда.

Шаг 4. Находится

$$\bar{\varepsilon}^2(0) = \min_k \bar{\varepsilon}_k^2(0).$$

Заключительный этап. Двигаясь таким образом и делая последовательную замену переменных, вычисляются выражения для искомой модели в исходном пространстве описаний. Далее на проверочной выборке для каждой из этих моделей находится оценка

$$\bar{\varepsilon}_s^2 = \frac{1}{N_{\text{прог}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{прог}}} (Y(k) - Y_k^{(s)})^2$$

(где $Y(k)$ — действительное выходное значение в k -й точке проверочной выборки; $Y_k^{(s)}$ — выходное значение в k -й точке проверочной выборки в соответствии с s -й моделью) и определяем F лучших моделей [3].

При помощи модуля *Excel ToolBox* исходный массив информации (база данных по никелевым сплавам с монокристаллической структурой) был интегрирован с *MatLab 6*, в котором проводился ряд экспериментов по генерации моделей методом МГУА, в итоге получены следующие результаты:

модель № 1

$$y = 1.80e-01 * x_1 + 8.75e-02 * x_3 * x_6 + 5.77e-02 * x_3 * x_5 + 2.06e+0 * x_9 + 1.05e-2 * x_3 * x_4 - 8.27e-03 * x_2 * x_3 - 6.56e-02 * x_8; \text{ при значении критерия} = 1.99e+01;$$

модель № 2

$$y = 9.89e-02 * x_1 + 7.82e-02 * x_1 * x_9 + 3.55e-02 * x_3 * x_6 + 3.89e-2 * x_3 * x_5 + 1.49e+0 * x_9 + 7.58e-02 * x_3 * x_4 + 4.37e-03 * x_8 + 5.74e+0 * x_7; \text{ при значении критерия} = 1.68e+02;$$

модель № 3

$$y = 1.39e-01 * x_1 + 3.26e-02 * x_1 * x_9 + 5.08e-02 * x_3 * x_5 + 1.62e-02 * x_2 * x_3 - 1.32e-02 * x_8 + 4.18e-03 * x_3 * x_4 - 8.41e+0 * x_9 + 6.72e+0 * x_7; \text{ при значении критерия} = 1.69474e+02;$$

где $x_1=C$; $x_2=Cr$; $x_3=Ni$; $x_4=Co$; $x_5=Mo$; $x_6=W$; $x_7=Ti$; $x_8=Al$; $x_9=B$.

Модели, построенные по алгоритмам МГУА, по своим прогнозирующим свойствам значительно превосходят регрессионные модели в силу того, что по этим алгоритмам автоматически (за счет применения критерия внешнего дополнения) отбираются аргументы (факторы), наиболее информативные для данного объекта моделирования. При проверке моделей на реальных сплавах модели, полученные по МГУА, предсказывают свойство с ошибкой 6-10%, в то время как регрессионные модели допускают ошибку порядка 20%.

С целью подтверждения результатов полученных предыдущим методом был использован метод, который состоит в использовании многомерных ортогональных нормированных сплайнов (МОНС), соответствующих модели «искусственного нейрона» [6, 7]. МОНС представляет собой поверхность, образованную суперпозицией взаимно перпендикулярных одномерных сплайнов — графиков сложных функций в виде совокупности склеенных участков кривых дуг специальной формы. Данным методом были получены следующие модели:

модель № 1

$$y = 1.74e-01 * x_1 + 7.5e-02 * x_3 * x_6 + 3.85e-01 * x_3 * x_5 + 1.09e+0 * x_9 + 1.05e-03 * x_3 * x_4 - 8.27e-05 * x_2 * x_3 - 6.56e-02 * x_8; \text{ при значении ошибки} = 2.06e+01;$$

модель № 2

$$y = 11e-02 * x_1 + 5.45e-02 * x_1 * x_9 + 4.5e-01 * x_3 * x_6 + 4.3e-02 * x_3 * x_5 + 1.49e+0 * x_9 + 7.58e-05 * x_3 * x_4 + 6.01e-03 * x_8 + 5.74e+0 * x_7; \text{ при значении ошибки} = 1.5e+02;$$

модель № 3

$$y = 3.57e-03 * x_1 + 3.76e-01 * x_1 * x_9 + 3.78e-02 * x_3 * x_5 + 2.83e-03 * x_2 * x_3 - 1.32e-02 * x_8 + 4.18e-03 * x_3 * x_4 - 8.41e+0 * x_9 + 6.72e+0 * x_7; \text{ при значении ошибки} = 1.4e+02;$$

где $x_1=C$; $x_2=Cr$; $x_3=Ni$; $x_4=Co$; $x_5=Mo$; $x_6=W$; $x_7=Ti$; $x_8=Al$; $x_9=B$.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сравнение прогнозирующих свойств моделей представлено на рис. 3, где Sigma (по оси ординат) — фактические значения жаропрочностей, М2 и М3 — методы МГУА и МОНС соответственно, по оси абсцисс — количество сплавов [9].

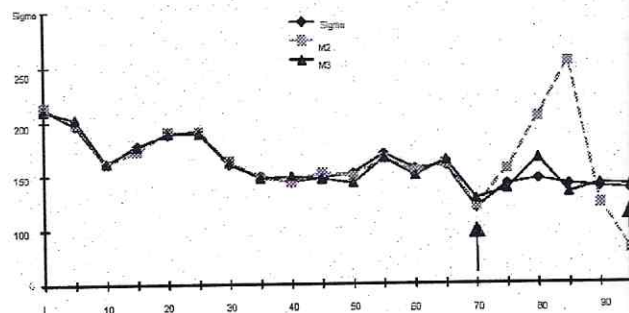


Рис. 3. Сравнение прогнозирующих свойств моделей

Таким образом, предлагаемая новая методика проектирования литейных никелевых жаропрочных сплавов для получения отливок с монокристаллической структурой, основанная на использовании априорной информации о составах и свойствах известных сплавов, позволяет в 3...4 раза сократить сроки создания многокомпонентных сплавов, сэкономить

расходование дорогостоящих материалов и значительно снизить трудозатраты.

ВЫВОДЫ

Все вышеописанные методы реализованы в «Системе автоматизированного проектирования литейных никелевых сплавов» на основе пакета *MatLab 6.0*. Таким образом, комплексное использование различных математических методов и методов искусственного интеллекта позволяет получать наиболее адекватные математические зависимости вида «состав-свойство», прогнозировать жаропрочность и получать новые составы сплавов [3].

С помощью указанной методики разработаны новые составы сплавов, обладающие высоким уровнем жаропрочных и литейных свойств.

Автоматизированное проектирование сплавов позволяет существенно ускорить процесс разработки новых материалов, сделать его менее затратным, избегая многократного проведения опытов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Симс, Ч. Т. Суперсплавы II: Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок / Ч. Т. Симс, Н. С. Столофф, У. К. Хагель ; пер. с англ. под ред. Р. Е. Шалина. М. : Металлургия, 1995. Кн. 2. 384 с.
2. Ивахненко, А. Г. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным / А. Г. Ивахненко, Ю. П. Юрачковский. М. : Радио и связь, 1987. 120 с.
3. Вишняков, А. С. Реализация принципов объектно-ориентированного программирования при моделировании алгоритмов метода группового учета аргументов / А. С. Вишняков // Принятие решений в условиях неопределенности : межвуз. науч. сб. Уфа : УГАТУ, 2004. С. 110-116.
4. Нургаянова, О. С. Применение регрессионного анализа к построению зависимостей «состав-свойство» / О. С. Нургаянова, А. А. Ганеев // Компьютерное моделирование – 2005 : матер. 6-й междунар. конф. 2005.
5. Nurgayanova, O. S. An experiments design system for superalloys synthesis / O. S. Nurgayanova, D. V. Popov, A. A. Ganeev // Proc. of the 5th Int. Workshop on Computer Science and Information Technologies CSIT'2003. Ufa, Russia, 2003. Vol. 2.
6. Ганеев, А. А. Нейросетевой подход к прогнозированию жаропрочности литейных никелевых сплавов / А. А. Ганеев, О. С. Нургаянова // Искусственный интеллект в XXI веке. Пенза, 2004.
7. Ганеев, А. А. Подходы к автоматизации проектирования новых литейных жаропрочных никелевых сплавов / А. А. Ганеев, О. С. Нургаянова // Вестник Алтайского государственного технического университета. 2005. № 3-4.
8. Пустовгаров, Ю. Л. Применение метода статистического моделирования для синтеза сплавов / Ю. Л. Пустовгаров, О. С. Нургаянова // Литейные процессы : межрег. науч. сб. Магнитогорск, 2005. Вып. 5.
9. Ганеев, А. А. Сравнение прогнозирующих свойств моделей регрессионного типа и МГУА при проектировании никелевых сплавов / А. А. Ганеев, О. С. Нургаянова // Мавлютовские чтения : сб. тр. Уфа : УГАТУ, 2006. Т. 5.