

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

*А.А. Ганеев, Е.Ф. Шайхутдинова, Б.А. Кулаков, А.И. Мезенцева*

## THEORETICAL BASICS OF COMPUTER-ASSISTED ENGINEERING OF HIGH-TEMPERATURE NICKEL CASTING ALLOYS

*A.A. Ganeev, E.F. Shaikhutdinova, B.A. Kulakov, A.I. Mezentseva*

Рассматриваются теоретические основы синтеза жаропрочных сплавов на основе данных пассивного эксперимента. Предлагается решение проблемы наполнения базы данных для математического моделирования. Предложен новый метод автоматизированного проектирования литейных жаропрочных никелевых сплавов.

*Ключевые слова:* литейный никелевый сплав, автоматизированное проектирование, синтез сплавов, интерполяция, электронная плотность, жаропрочность.

The paper covers the theoretical basis of synthesis of high-temperature alloys based on passive experiment. A solution to the problem of database filling for mathematic simulation is suggested. A new method of computer-assisted engineering of high-temperature nickel casting alloys is proposed.

*Keywords:* nickel casting alloys, computer-assisted engineering, alloy synthesis, interpolation, electron density, heat resistance.

Прогресс в области синтеза новых жаропрочных материалов в значительной степени сдерживается отсутствием эффективных и недорогих методик. Традиционные методы разработки новых материалов, основанные на эмпирических методах исследования влияния каждого легирующего элемента на структуру и свойства разрабатываемого сплава, не позволяют проводить комплексное изучение совместного влияния легирующих элементов на свойства сплавов и зачастую исключают возможность математической оптимизации химического состава сплавов с заданными свойствами на ЭВМ, требуют большого количества экспериментов, трудоемки, материалоемки. Приходится затрачивать огромные средства на исходные дефицитные материалы, дорогостоящее оборудование и проведение большого количества плавов и экспериментов. Эти затраты чаще всего не окупаются результатами поиска, поглощая большие человеческие ресурсы.

Таким образом, металловедение в своем эволюционном развитии подходит к тому, что эмпирический путь перестает удовлетворять требованиям к темпу и качеству создания новых материалов. Проблема разработки сплавов с заданными свойствами может быть решена только на основе сочетания методов классического металловедения, физики металлов, математических методов анализа и синтеза.

Поэтому проблема разработки новых методик автоматизированного проектирования жаропроч-

ных материалов в настоящее время достаточно актуальна. В первую очередь, это связано с необходимостью существенного уменьшения сроков проектирования и материальных затрат, обусловленных проведением большого числа опытных плавов, невысокой эффективностью большинства существующих методов проектирования новых сплавов, которые не позволяют определять прямую связь между составом и жаропрочностью сплавов. Особую сложность решаемой задаче придают зашумленность, малая информативность и значительная размерность исходных данных по составам, структурам и свойствам никелевых сплавов [7]. Предлагаемый подход базируется на концепции пассивного эксперимента, призван ускорить процесс разработки новых материалов, сделать его результаты более предсказуемыми, ограничить экспериментальную часть исследования лишь проведением контрольных плавов.

В настоящее время общая концепция синтеза сплавов, предложенная и обоснованная в работах [1, 2], включает в себя два основных направления – активное планирование эксперимента и использование данных пассивного эксперимента, под которыми подразумевается накопленная информация о составе и свойствах разработанных и применяемых жаропрочных никелевых сплавов. В рамках сформулированной постановки задача проектирования жаропрочных никелевых сплавов была сведена к нахождению состава  $X_{\text{опт}}$  по максимуму функции жаропрочности  $Y(X, T) \rightarrow \max$  для ра-

бочих температур  $T \geq 1100^\circ\text{C}$  с учетом ограничений на концентрации элементов  $x_i^{\min} \leq x_i \leq x_i^{\max}$ , составляющих сплав, представимый в виде кортежа  $X = (x_1, \dots, x_m)$  [5].

Перспективными направлениями в представлении данных являются объектно-ориентированные базы данных (БД) и базы знаний, способные реализовывать сложные ситуации, недоступные реляционным системам управления базами данных (СУБД) [6]. Базы знаний применяют к реляционным системам БД логику предикатов, позволяя получать из данных, хранящихся в БД, дополнительную информацию более высокого уровня.

Наиболее эффективным и широко признанным подходом к проектированию реляционной базы данных является подход, основанный на концептуальной модели данных, которая затем автоматически преобразуется в нормализованную (до четвертой нормальной нормы) реляционную модель данных (РМД) [6].

Помимо БД по жаропрочным сплавам нужна еще и программная среда, в которой были бы реализованы основные необходимые функции выполнения манипуляций с содержащимися в ней данными. Для выполнения отдельных операций с БД можно использовать и известные программные средства (оболочки СУБД, электронные таблицы, математические пакеты). Однако для комплексной, гибко настраиваемой и эффективной работы над обозначенной проблемной областью встает задача разработки собственной глубоко интегрированной информационной системы для поиска, анализа и представления информации из БД, с широким спектром реализованных методов обработки информации и развитыми средствами прогнозирования. Разработанная информационно-поисковая система (ИПС) неразрывно связана с БД, потому что все средства доступа и обработки информации ориентированы на существующую структуру БД. ИПС посредством пользовательского интерфейса предоставляет пользователю средства как для табличного, так и для географического представления интересующей его информации, скрывая при этом все детали ее получения и особенности архитектуры БД [7].

Основой БД является банк данных на естественном языке, содержащий информацию по более чем 790 современным жаропрочным никелевым сплавам. В процессе создания БД по жаропрочным никелевым сплавам было осуществлено концептуальное проектирование и разработана нормализованная структура на базе реляционной модели данных, что позволило реализовать на ее основе эффективную ИПС с развитыми и эффективными средствами представления систематизированных сведений о жаропрочных никелевых сплавах по основным технологическим, механическим и эксплуатационным характеристикам, доступную в Internet [6].

Проведенные исследования позволили сформулировать основные недостатки структуры

представления сведений о жаропрочности сплавов из БД:

- большой диапазон температур и небольшое число сплавов, для которых известны значения жаропрочности;

- резкое различие объемов выборок при переходе с одной температуры на другую;

- группировка сплавов по температурам в зависимости от страны-производителя;

- наличие небольших и несовместных выборок свойств сплавов по температурам существенным образом будет отражаться на прогнозируемых составах и свойствах сплавов, поскольку неустойчивость любого прогноза на узком участке является показателем его невысокой достоверности.

Для преодоления перечисленных недостатков были разработаны метод и компьютерная программа повышения информативности БД, основанные на автоматическом индивидуальном подборе шкал нелинейного преобразования, обеспечивающего максимальное спрямление зависимости с учетом характера изменения жаропрочности от температуры каждого сплава из БД. Для этого решалась задача нахождения варианта  $i_{\text{опт}}$  сочетания ряда шкал по рабочей температуре ( $x$ ) и жаропрочности ( $y$ ) в соответствии с критерием оптимальности

$$i_{\text{опт}} = \frac{\arg \min_i \max_j \sqrt{\frac{1}{n_{V_{n_j}}} \sum_{x \in V_{n_j}} (y - Y_{V_{0_j}}^i(x))^2}}{\sqrt{\sum_{y \in V_{n_j}} y^2}} \quad (1)$$

на основе разбиения известных свойств сплава на обучающую  $V_0$  и проверочную  $V_n$  выборки и применения кубического сплайна, построенного на выборке  $V_0$  для нахождения относительно квадратичных отклонений интерполированных значений жаропрочности ( $Y^i(x)$ ) для температур из  $V_n$  от известных ( $y$ ) при использовании варианта  $i$  сочетания шкал. Применение описанного метода позволило для большинства сплавов в 2–15 раз повысить точность интерполяции жаропрочности. На диаграмме рис. 1 приведены размеры выборок значений 100-часовых жаропрочностей до (более темные части столбиков) и после проведения процедуры интерполяции, из которой видно, что для большинства температур произошло увеличение размера выборок значений жаропрочности в 2–3 раза [4].

Для построения математических моделей и получения в качестве результата состава сплава с более высокими свойствами необходимо оценить вероятность такого результата и содержательность информации из БД. Для оценки резервов повышения жаропрочности сплавов были разработаны математический метод и реализующая его компьютерная программа с применением способа

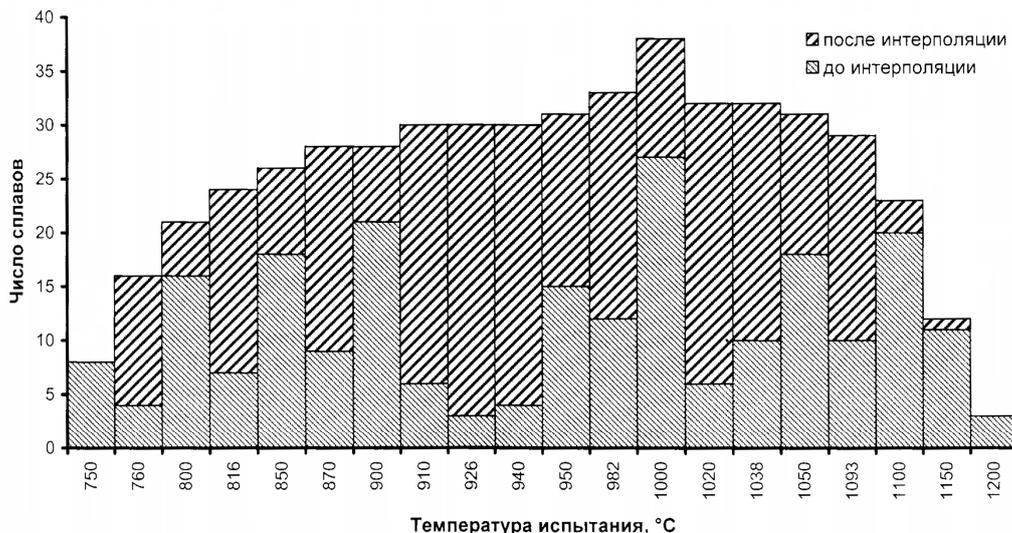


Рис. 1. Распределение числа сплавов по температурам до и после проведения интерполяции

информационной оценки, которая учитывает специфику БД по жаропрочным никелевым сплавам, связанную с необходимостью обработки объемов данных. Он основан на принципе максимизации энтропии Э.Т. Джайнса и позволяет на конструктивной основе, без выдвижения необоснованных гипотез, получать точечные и интервальные оценки максимального правдоподобия для закона распределения значений рабочей температуры в заданных для них физически оправданных границах.

Оценка резервов повышения жаропрочности никелевых сплавов основывалась на том положении, что наличие большого числа факторов, влияющих на значения рабочей температуры никелевых сплавов, позволяет рассматривать их как значения случайной величины  $X$  с некоторым законом распределения. Тогда вероятность нахождения принимаемых  $X$  значений в промежутке между максимальным значением  $x_M$  и правой границей возможных значений рабочей температуры  $b$  определяется по формуле

$$P(x_M < X < b) = 1 - F(x_M) = 1 - \int_a^{x_M} f(x) dx, \quad (2)$$

где  $a$  – левая граница возможных значений рабочей температуры;  $f$  – плотность распределения значений рабочей температуры, определяемая согласно методу информационной оценки как

$$f(x) = \exp(-\lambda_0 - \lambda_1 x - \lambda_2 x^2). \quad (3)$$

Неизвестные параметры  $\lambda_0$ ,  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  находятся из системы уравнений правдоподобия:

$$\begin{cases} \int_a^b (x^k - v_k^*) \exp\left(-\sum_{S=1}^m \lambda_S x^S\right) dx = 0, \\ k = 1, 2, \dots, m; \\ \lambda_0 = \ln \int_a^b \exp\left(-\sum_{S=1}^m \lambda_S x^S\right) dx \end{cases} \quad (4)$$

при  $m = 2$  начальных моментах и с учетом ограничений, определяющих класс распределений, где первые моменты совпадают с их статистическими оценками:

$$\sum_{i=1}^r x_i^k p_i^* = v_k^*, \quad k = 1, 2, \dots, r; \quad m < r; \quad (5)$$

$$v_k^* = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \xi_j^k, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (6)$$

а также условием нормировки вероятностей

$$\sum_{i=1}^r p_i^* = 1, \quad (7)$$

где  $\xi_i$  – выборочные значения  $X$ ;  $r$  – объем выборки сплавов из БД.

Для численного параметрического решения системы (4) применялся эффективный алгоритм [2].

Границы доверительной области для интервальной оценки распределения вероятностей рабочей температуры  $[1 - F_{\max}(x_M); 1 - F_{\min}(x_M)]$  определялись как огибающие семейства кривых (рис. 2) [2], построенных для выборок, сформированных из случайных чисел, распределенных по закону  $F(x)$  [4].

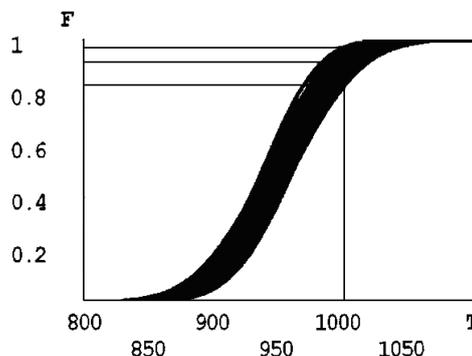


Рис. 2. Построение доверительной области распределения вероятностей рабочей температуры

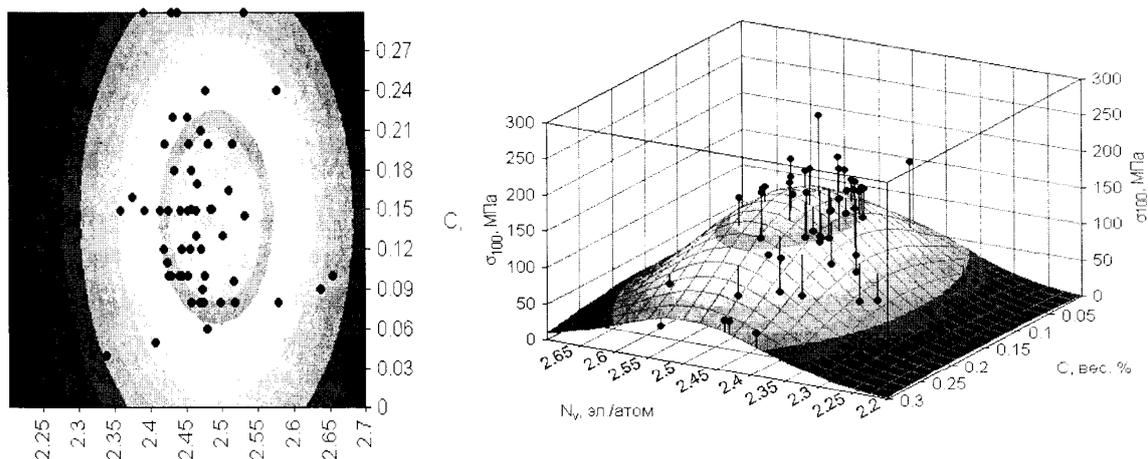


Рис. 3. Зависимость 100-часовой жаропрочности от электронной плотности никелевого сплава и концентрации легирующего элемента при температуре 1000 °С

На основе компьютерной программы было осуществлено прогнозирование, показавшее с надежностью 0,99 существование резервов повышения рабочей температуры жаропрочных никелевых сплавов на 40...80 °С для 100-часовой длительной прочности в диапазоне напряжений 100...300 МПа [5].

Решение задачи синтеза новых жаропрочных сплавов осуществлялось с применением широкого спектра математических методов анализа и преобразования информации из БД, ориентированных на работу с малым количеством статистических данных. Проведенный анализ математических методов показал, что наиболее оптимальным является комплексное применение метода группового учета аргументов (МГУА) с методами информационной оценки (МИО) и главных компонент (МГК) для определения оптимальных составов в рамках автоматизированной системы синтеза жаропрочных никелевых сплавов. Отличительной особенностью данной системы является использование данных пассивного эксперимента на основе накопленного и собранного в БД статистического материала по составам и свойствам жаропрочных никелевых сплавов.

Специфика задачи синтеза жаропрочных никелевых сплавов делает затруднительным и малоэффективным применение традиционных методов регрессионного анализа, в отличие от которых МГУА при осуществлении некоторых модификаций и адаптации позволяет строить математические модели, оптимальные по критерию краткосрочного прогноза значений жаропрочности для новых сплавов. Для этого была разработана модифицированная многорядная схема группового учета аргументов, основанная на принципах массовой селекции и самоорганизации, с предварительной ортогонализацией и стандартизированием данных о составах жаропрочных никелевых сплавов, а также компьютерная программа, реализующая метод селекции моделей, в котором, в отличие от

классического скрещивания отобранных моделей, применена многоэтапная итерационная процедура последовательного наращивания их сложности, что позволило достигнуть глубины критерия регулярности, достаточной для осуществления прогнозирования жаропрочности никелевых сплавов с более высокой точностью по сравнению с ранее применяемыми в области синтеза сплавов регрессионными методами при обеспечении минимально возможной сложности математической модели влияния легирующих элементов на жаропрочность. Адекватность генерируемых моделей проверялась непараметрическими методами, позволяющими устанавливать требуемую точность прогнозирования жаропрочности.

Применение адаптированного и модифицированного методов группового учета аргументов позволило получить достоверные и оптимальные по критерию регулярности прогнозы жаропрочности в зависимости от значений рабочей температуры, в результате чего реализовалась возможность получения прогнозируемого вида кривой изменения жаропрочности от рабочей температуры для произвольного состава жаропрочного никелевого сплава.

Однако задачей синтеза жаропрочных никелевых сплавов является не только нахождение математической модели влияния концентраций легирующих элементов на жаропрочность никелевых сплавов на основании информации из массива исходных данных, но и определение состава, которому отвечает максимальное прогнозируемое значение жаропрочности, что осуществлялось применением метода поиска максимума эмпирической функции, определяемой найденной моделью. Эвристический характер МГУА, а также сложная структура жаропрочных никелевых сплавов потребовали подтверждения того, что концентрации легирующих элементов спрогнозированного с использованием МГУА оптимального сплава попали в доверительный интервал для максимально прав-

доподобной оценки координат моды эмпирической многомерной плотности распределения, построенной МИО по ортогонализированным значениям из массива исходных данных [5]. Такое дублирование и сочетание различных математических методов прогнозирования оптимальных составов и свойств сплавов позволило исключить влияние на полученные результаты систематической ошибки того или иного метода и повысить их достоверность.

С помощью описанной методики был синтезирован новый многокомпонентный высокожаропрочный никелевый сплав для рабочих лопаток ГТД.

Предварительно проведена оценка разработанных сплавов на предмет потенциальной возможности образования топологически плотно упакованных (ТПУ) фаз на основе методики Phfcomp. Для этого были построены специальные диаграммы зависимости жаропрочности при исследуемых температурах от электронной плотности сплава и концентраций легирующих элементов [3]. На рис. 3 приведены зависимости 100-часовой жаропрочности от электронной плотности и концентрации углерода. Аналогичные графики построены для всех легирующих элементов новых сплавов для температур 800, 900, 950, 975, 1000 и 1050 °С.

Разработанные комплексная методика и автоматизированная система построения математических моделей для синтеза жаропрочных никелевых сплавов с использованием априорной информации о составе и свойствах известных сплавов в качестве данных пассивного эксперимента позволяют по сравнению с существующими методами в 4–5 раз сократить сроки создания новых многокомпонентных сплавов, снизить в 40–50 раз трудозатраты, сэкономить в 10–20 раз дефицитные и дорого-

стоящие материалы в результате доведения количества необходимых плавок до минимального.

#### Литература

1. Автоматизированная система построения математической модели для синтеза литейных жаропрочных сплавов / А.А. Ганеев, Д.В. Попов, П.В. Аликин, П.Н. Никифоров // *Литейщик России*. – 2009. – № 6. – С. 22–24.
2. Ганеев, А.А. Математическое моделирование влияния легирующих элементов на жаропрочность никелевых сплавов с монокристаллической структурой / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова, С.П. Павлинич // *Вестник УГАТУ*. – 2006. – Т. 8, № 1 (17). – С. 91–96.
3. Исследование литейных и физико-механических свойств нового монокристалльного никелевого жаропрочного сплава УГАТУ-4 / А.А. Ганеев, П.Н. Никифоров, С.П. Павлинич, А.А. Дьяконова // *Литейные процессы: межрегион. сб. науч. тр. – Магнитогорск: МГТУ, 2005. – Вып. 5. – С. 40–44.*
4. Ганеев, А.А. Интерполяция жаропрочности никелевых сплавов / А.А. Ганеев, Д.В. Попов, В.С. Жернаков // *Проблемы и перспективы развития литейного производства: материалы Международ. науч.-практ. конф. – Барнаул, 2000. – С. 29–36.*
5. Ганеев, А.А. Применение регрессионного анализа к построению зависимостей «состав–свойство» / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // *Компьютерное моделирование 2005: сб. тр. 6-й междунар. науч.-техн. конф. – СПб., 2005. – С. 114–117.*
6. Ганеев, А.А. Разработка базы данных по теплофизическим свойствам жаропрочных никелевых сплавов / А.А. Ганеев, А.В. Староверова // *Ползуновский альманах. – 2008. – № 3. – С. 171–172.*
7. Гуляев, Б.Б. Физико-химические основы синтеза сплавов / Б.Б. Гуляев. – Л.: Изд-во Ленинградского университета, 1980. – 192 с.

Поступила в редакцию 27 февраля 2012 г.