

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ СИНТЕЗА ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

А.А. Ганеев, Д.В. Попов, О.С. Нургаянова

Традиционные методы поиска состава новых сплавов с требуемыми свойствами весьма трудоемки и включают многократные выплавки опытных образцов с последующим испытанием их на механические свойства и математической обработкой результатов. Из-за сложного механизма легирования и многофазной структуры жаропрочных никелевых сплавов возможность подобрать точную математическую зависимость между составом и свойствами в настоящее время является невыполнимой. Вследствие этого наиболее перспективные сплавы могут оказаться за пределами исследовательских возможностей. Поэтому необходимо разрабатывать и применять интеллектуальные методы синтеза сплавов.

Выделим следующие основные группы методов, применяемые при синтезе сплавов:

- металлофизические методы основаны на изучении металлов и сплавов средствами экспериментальной и теоретической физики;
- традиционные методы заключаются в последовательном введении в основу легирующих элементов сначала по одному, затем в виде групп;
- статистические методы базируются на изучении исследований, данных пассивного эксперимента;
- кибернетический метод с проведением активного эксперимента.

Как показывает накопленный опыт, во многих случаях при выборе составов сплавов недостаточно применения планирования экспериментов методом крутого восхождения при линейных дробных факторных планах. Метод планирования эксперимента позволяет значительно сократить количество проводимых экспериментов для выявления оптимального химического состава. Таким образом, задачу синтеза новых сплавов можно

свести к нахождению некоторого оптимального плана эксперимента.

Центральным в теории планирования эксперимента является принцип оптимальности плана. В соответствии с ним план эксперимента должен обладать некоторыми оптимальными свойствами с точки зрения определенного, заранее выбранного критерия оптимальности плана. Известно достаточно много критериев оптимальности. Основные из них: критерий ортогональности, критерий A -оптимальности и критерий E -оптимальности. Проведенный анализ критериев оптимальности планов экспериментов показал, что наиболее предпочтительным для оценок коэффициентов модели является критерий D -оптимальности, обеспечивающий минимум определителя ($\det$) матрицы дисперсий-ковариаций:

$$\Psi^D = \min \det(X^T X)^{-1}.$$

Этот критерий связан с оценкой уравнения регрессии в целом, получение минимальной обобщенной дисперсии коэффициентов обеспечивает достаточные предсказательные свойства модели внутри области эксперимента. Согласно теореме, если план является D -оптимальным, то он является A - и E -оптимальным. Тем более что он является наиболее информативным, поскольку использует все элементы корреляционной матрицы. Таким образом, оптимизационная задача нахождения D -оптимального плана эксперимента, состоящего из заданного числа N опытов, может быть сформулирована следующим образом:

$$|(X^{*T} X^*)| = \min |(X^T X)|, \text{ где } X \in \Omega_x$$

Здесь X^* - D -оптимальный план.

Теперь перейдем к построению самого D -оптимального плана. В силу отсутствия точного алгоритма для построения D -оптимального плана и в связи с большой

Данное исследование частично поддержано грантом РФФИ 03-07-90242 (2003-2005 гг.) и ФЦП "Интеграция науки и высшего образования Российской Федерации на 2002-2006 годы" (проект П0039).

размерностью задачи предлагается воспользоваться каким-либо из эвристических методов, в данном случае генетическим алгоритмом. При построении D -оптимального плана на основе генетического подхода используются следующие стадии: генерация случайной начальной популяции и генетические операторы – отбор элиты, скрещивание, селекция и мутация. На каждом шаге-итерации развития популяции динамически изменяется ее состав. Эти изменения моделируются генетическими операторами, которые применяются до тех пор, пока не будет завершена работа алгоритма. Алгоритм комбинирует случайный поиск D -оптимальных планов "от плана к плану" с использованием генетических операторов (скрещивание, мутация, селекция), улучшающих популяцию планов с точки зрения оценочного критерия. Определим основные понятия ГА применительно к построению D – оптимального плана:

- популяция – всевозможные планы экспериментов.
- хромосомы – строки матрицы плана эксперимента.
- гены – элементы строк (концентрации химических элементов в сплаве).

Алгоритм построения D -оптимального плана.

Шаг 1. В качестве начальной популяции случайным образом задается несколько невырожденных планов экспериментов ($X_i^T X_j \neq 0$).

Шаг 1.1 (Скрещивание). Из матриц

случайным образом выбираются строки из которых создается планы экспериментов новой популяции.

Шаг 1.2 (Мутация). В полученном на предыдущем шаге плане случайным образом выбирается строка, в которой какой-либо элемент заменяется на другое число. Каждая строка плана в свою очередь нормируется согласно правилу:

$$\sum_{i=1}^k x_{ij}^2 = 1, \quad j=1 \dots N,$$

где j – число строк (опытов) в плане, i – количество факторов (элементы сплава).

Шаг 1.3 (Выбор наилучших). Отбор наилучших планов экспериментов производится согласно критерию D -оптимальности:

$$\Psi^D = \min \det(X^T X)^{-1}$$

Шаг п. (Условие выхода). Условием остановки алгоритма служит относительная близость плана к D -оптимальному.

Основная трудность описанного выше алгоритма заключается в выборе планов, составляющих начальную популяцию. Проведенный анализ планов экспериментов выявил, что для синтеза сплавов наибольшим образом подходят планы дробно-факторного эксперимента и симплекс-планы. На базе вышеприведенного алгоритма была реализована система планирования эксперимента для синтеза новых сплавов, позволяющая генерировать D -оптимальные планы и по ним рассчитывать стоимость проведения экспериментов. Такой подход позволяет минимизировать затраты на разработку новых сплавов и ускорить процесс их проектирования.