

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СОСТАВ-СВОЙСТВО ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ МНОГОМЕРНЫМ КОРРЕЛЯЦИОННЫМ СПЛАЙНОМ

А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова (г. Уфа, Россия)

При анализе данных эмпирических наблюдений, как правило, всегда возникает необходимость представления экспериментального облака точек в виде графика или поверхности искомой генеральной совокупности (трендом или регрессией). Влияние легирующих элементов на жаропрочность литейных никелевых сплавов также удобно описывать уравнением регрессии. Таким образом, постановка задачи аппроксимации корреляционной зависимости жаропрочности от химического состава сплава сводится к тому, чтобы через облако точек провести поверхность

$$Y=A_0+A_1X_1+A_2X_2+\dots+A_NX_N, \quad (1)$$

которая бы наилучшим образом отражала эту зависимость при минимуме ошибок, как на исходных данных, так и на контрольной выборке, где Y – 100-часовая жаропрочность (МПа), $X_1, X_2, \dots, X_N$ – химический состав сплава.

Использование функциональных и сглаживающих сплайнов для описания корреляционных зависимостей такого типа не представляется возможным как в виду громоздкости соответствующего математического описания и гигантских объемов вычислений для определения параметров сплайна, так и неустойчивости получаемых результатов. Этих

недостатков можно избежать, используя сплайн, количество узлов которого многократно меньше числа экспериментальных точек. Таковым является многомерный корреляционный сплайн, представляющий собой ничто иное, как математическую модель нейрона.

При помощи пакета *Statistica 6.0* был проведен корреляционный анализ факторов исследуемой зависимости для монокристаллических сплавов. Ниже приведена матрица парных коэффициентов корреляций Пирсона (таблица 1) при уровне значимости $p < 0,100$, значимые коэффициенты корреляции выделены.

Несмотря на простоту уравнения (1), оно позволяет с приемлемой точностью моделировать достаточно большой круг объектов, но вместе с тем обладает и следующими основными недостатками. Во-первых, линейаризация реальных зависимостей приводит к высокой погрешности. Во-вторых, существенно нелинейные зависимости (от аргументов X_i) ввиду малых значений коэффициентов A_i (производных от коэффициентов линейной корреляции) ошибочно считаются несущественными и из моделей исключаются. В-третьих, при отсутствии хотя бы одного аргумента вычисление функции становится невозможным.

Таблица 1 – Матрица парных коэффициентов корреляций Пирсона

	C	Cr	Co	Mo	W	Ti	Al	Nb	Ta	B	Zr	Hf	V	Re	Ru	Ir	Ni
C	1	0,14	0,34	-0,06	0,28	0,0104	0,01	0,53	-0,32	0,642	0,382	0,312	-0,082	-0,022	-0,15	-0,057	-0,24
Cr	0,141	1	0,19	0,21	-0,11	0,68	0,033	-0,05	-0,006	0,172	-0,003	0,0826	0,026	-0,37	-0,122	-0,115	-0,44
Co	0,343	0,19	1	-0,13	0,109	0,269	0,04	0,2	-0,15	0,234	0,0778	0,154	0,072	0,164	-0,19	0,104	-0,6
Mo	-0,057	0,21	-0,13	1	-0,2	0,276	0,28	0,026	-0,091	-0,046	-0,043	0,0717	-0,088	-0,15	-0,17	0,015	-0,14
W	0,284	-0,11	0,109	-0,2	1	-0,24	0,034	0,38	0,129	0,1378	0,0867	0,1247	-0,21	0,009	-0,055	-0,005	-0,47
Ti	0,0104	0,68	0,27	0,28	-0,2	1	-0,15	0,061	-0,34	-0,06	-0,024	-0,003	0,008	-0,39	-0,095	-0,08	-0,21
Al	0,0097	0,03	0,04	0,28	0,034	-0,15	1	-0,03	0,028	-0,021	0,1094	0,0391	0,397	0,132	0,044	0,015	-0,36
Nb	0,526	-0,05	0,2	0,026	0,38	0,0614	-0,03	1	-0,19	0,166	0,141	-0,028	-0,006	0,029	-0,117	-0,039	-0,23
Ta	-0,32	-0,01	-0,2	-0,09	0,129	-0,34	0,028	-0,19	1	-0,092	-0,16	0,0014	-0,137	0,398	0,101	0,049	-0,36
B	0,642	0,17	0,23	-0,05	0,138	-0,06	-0,02	0,17	-0,092	1	0,307	0,353	-0,127	0,139	-0,119	-0,044	-0,21
Zr	0,382	-0	0,078	-0,04	0,087	-0,024	0,109	0,14	-0,16	0,307	1	0,366	-0,075	-0,016	-0,078	-0,026	-0,041
Hf	0,312	0,08	0,15	0,072	0,125	-0,003	0,039	-0,03	0,001	0,353	0,366	1	-0,028	0,071	-0,048	-0,017	-0,23
V	-0,082	0,03	0,072	-0,09	-0,2	0,0076	0,4	-0,01	-0,137	-0,127	-0,075	-0,028	1	-0,063	-0,024	-0,02	-0,03
Re	-0,022	-0,4	0,16	-0,1	0,009	-0,39	0,132	0,029	0,398	0,139	-0,016	0,071	-0,063	1	0,302	0,173	-0,28
Ru	-0,15	-0,12	-0,2	-0,2	-0,05	-0,095	0,044	-0,12	0,101	-0,119	-0,078	-0,048	-0,024	0,302	1	-0,021	0,018
Ir	-0,057	-0,11	0,104	0,015	-0,01	-0,08	0,015	-0,04	0,049	-0,044	-0,026	-0,017	-0,02	0,173	-0,021	1	-0,076
Ni	-0,24	-0,4	-0,6	-0,1	-0,5	-0,21	-0,36	-0,23	-0,36	-0,21	-0,041	-0,23	-0,03	-0,28	0,018	-0,076	1

Указанные недостатки устраняются при использовании уравнения вида:

$$Y = F_0 + \frac{F_1(X_1) + F_2(X_2) + \dots + F_n(X_n)}{B_1 + B_2 + \dots + B_n}, \quad (2)$$

где F_0 – постоянная составляющая функции; $F_i(X_i)$ – сплайн-составляющие функции от отдельных аргументов; B_i – веса аргументов в долях единицы, нормирующие вклад каждого из них в функцию.

Использование в уравнении (2) весов B_i позволяет вычислять моделируемый параметр Y в условиях, когда часть информации о значениях исходных данных отсутствует или является недостоверной. При этом числитель и знаменатель дроби уменьшаются синхронно так, что результат деления почти не изменяется. В геометрической интерпретации уравнению (2) соответствует поверхность сложной формы, образующими и направ-

ляющими которой являются одномерные сплайны $F_i(X_i)$.

Ниже приведена одна из сплайн-моделей прогноза жаропрочности никелевых монокристаллических сплавов (рисунки 1, 2, 3).

Аналогичным образом построены корреляционные сплайны для остальных элементов, составляющих сплав.

Проведенные вычисления по вышеописанной методике Б.В.Хакимова показали, что прогнозное значение, на которое может быть улучшена жаропрочность после 1000 °С для выбранной группы сплавов при выбранном шаге в 10 °С $\Sigma F = 37$, следовательно, $Y = S(\Sigma F) = 10$.

Полученный прогноз не противоречит реальным данным.

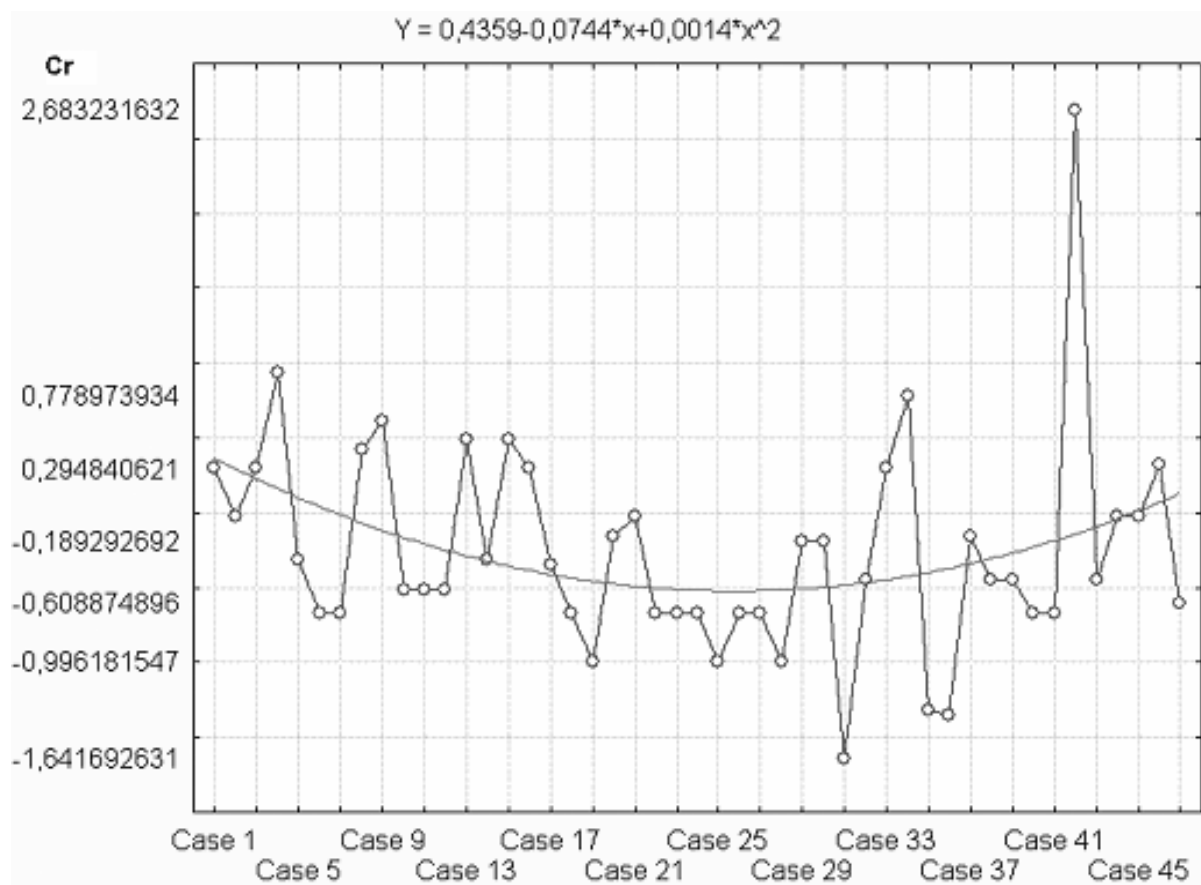


Рисунок 1 – Корреляционный сплайн для Cr

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СОСТАВ-СВОЙСТВО ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ МНОГОМЕРНЫМ КОРРЕЛЯЦИОННЫМ СПЛАЙНОМ

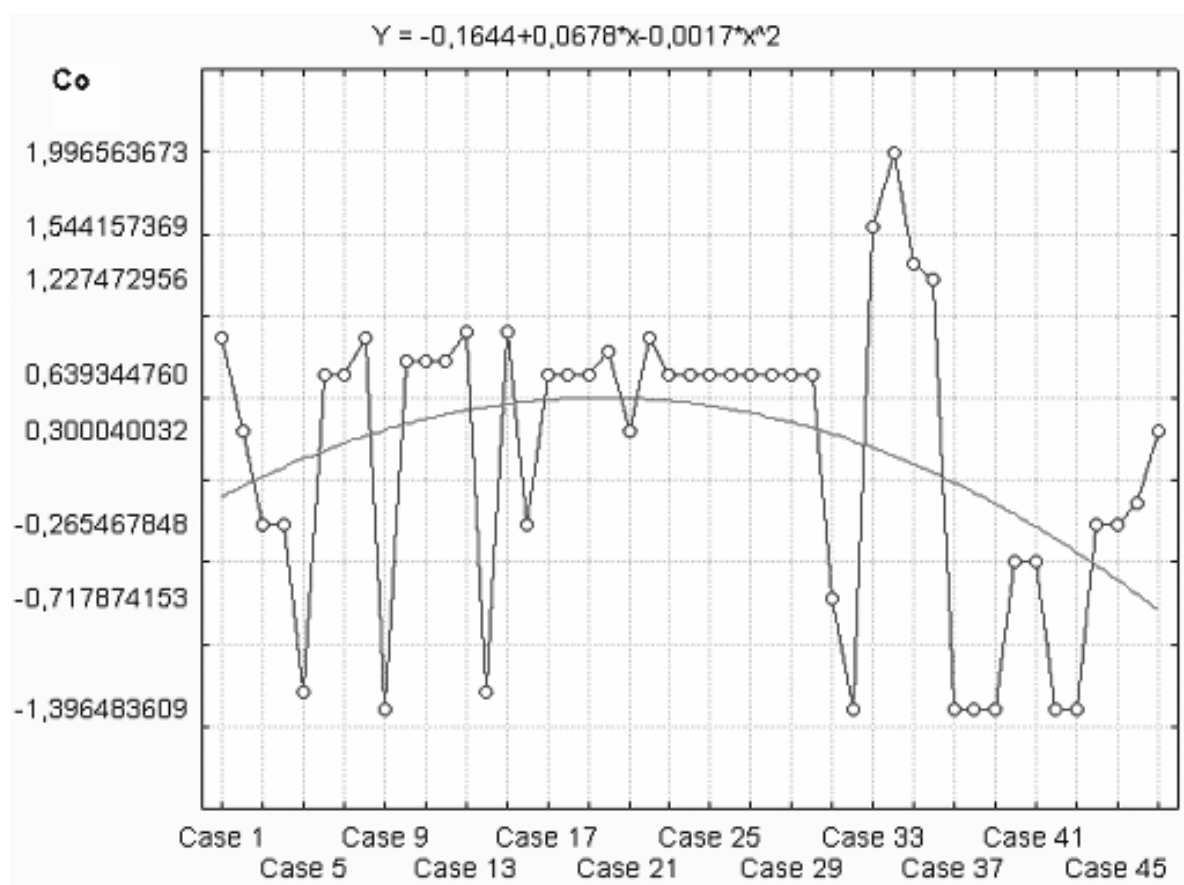


Рисунок 2 – Корреляционный сплайн для Co

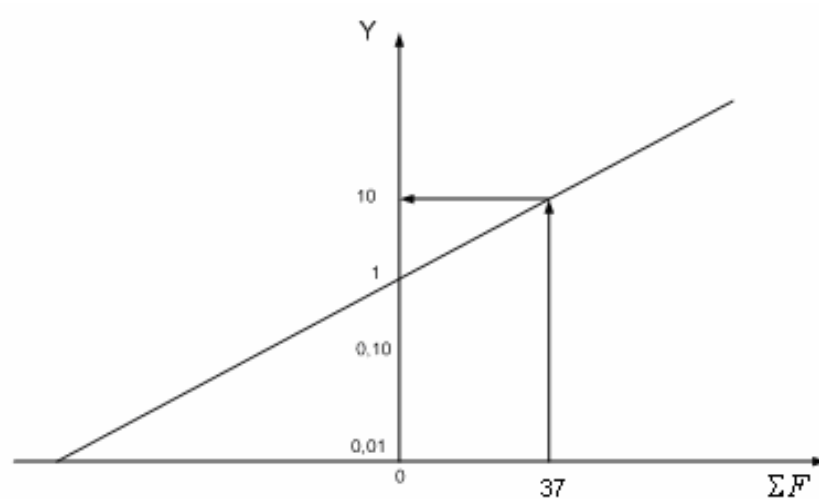


Рисунок 3