

СИНТЕЗ СПЛАВОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

Е. Ф. Шайхутдинова, А. А. Ганеев, А. И. Мезенцева

Уфимский государственный авиационный университет,
г. Уфа, Россия

Термин «синтез сплавов», предложенный Б. Б. Гуляевым, подразумевает создание нового сплава, обладающего требуемым комплексом свойств. Основные группы методов, применяемые при синтезе сплавов:

- Металлофизические методы, основанные на изучении металлов и сплавов средствами экспериментальной и теоретической физики.

- Традиционные методы, которые заключаются в последовательном введении в основу легирующих элементов (ЛЭ) сначала по одному, затем в виде групп. Решение о влиянии тех или иных элементов на свойства сплава выносится исходя из результатов испытаний. Сплав, показавший наилучшие результаты, считается оптимальным.

- Кибернетический метод с проведением активного эксперимента. Как показывает накопленный опыт, во многих случаях при выборе составов сплавов достаточно применения планирования экспериментов методом крутого восхождения.

- Статистические методы, основанные на изучении данных серийного производства, то есть данных пассивного эксперимента, в том числе интеллектуальные методы типа метода искусственных нейронных сетей (ИНС), экспериментальная часть исследования которых ограничивается проведением нескольких контрольных плавов.

В настоящий момент не существует методов, которые сочетали бы в себе строгий научный подход традиционных методик с преимуществами применения современной вычислительной техники, и позволяли бы в виде единой математической модели описать влияние ЛЭ на свойства литейных сплавов.

Большое число ЛЭ и сложный механизм легирования литейных сплавов определяют сложный вид математической модели влияния ЛЭ на свойства литейных сплавов, с большим количеством локальных экстремумов, в областях которых небольшое изменение соотношения элементов ведет к резкому изменению свойств сплавов. Точное описа-

ние вида этой модели не представляется возможным в силу отсутствия полной количественной теории комплексного влияния структурных и фазовых факторов на свойства сплавов.

Единственным выходом в данной ситуации представляется комплексное использование математических методов для восстановления связи между составом сплавов и их свойствами, ориентированных на обработку массивов исходных данных. Т.е. необходимо создание нового синтетического метода на основе следующих традиционных методик:

1. Математического метода - для расчета математических моделей влияния ЛЭ на свойства литейных сплавов, обладающих повышенными экстра- и интрополяционными свойствами и для определения максимального значения функции отклика, т.е. свойства.

2. Активного эксперимента – для подтверждения результатов, полученных методами математического моделирования.

Схема синтеза литейных сплавов представлена на рисунке 1.

Анализ рассмотренных методов математического моделирования показал, что для решения задач синтеза литейных сплавов могут применяться интеллектуальные методы (искусственные нейронные сети (ИНС) и метод группового учета аргументов (МГУА). Методы МГУА и ИНС, при осуществлении некоторых модификаций и адаптаций, позволяют строить математические модели, оптимальные по критерию краткосрочного прогноза значений физико-механических свойств для новых литейных сплавов. Переборный характер МГУА, а также сложная система селекции полученных этим методом математических моделей не позволяет использовать данный метод в рамках исследования влияния химического состава на физико-механические свойства литейных сплавов. Таким образом, метод ИНС оптимально соответствует задаче проектирования литейных сплавов.

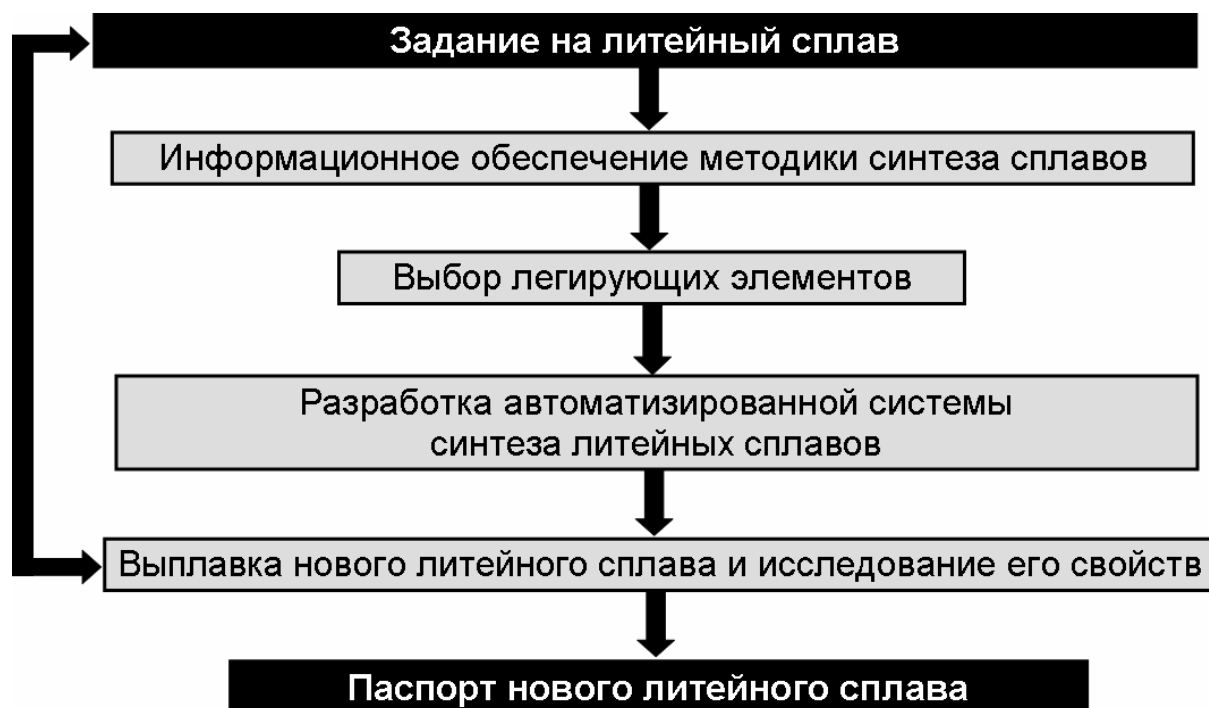


Рисунок 1 – Схема методики синтеза литейных сплавов

Синтез сплавов с использованием метода искусственных нейронных сетей рассматривается на примере проектирования литейных никелевых стоматологических сплавов (СС).

Для информационного обеспечения синтеза литейных никелевых СС необходимо создание тематической БД.

В созданную тематическую БД по литейным никелевым СС вошли сведения о составах и физико-механических свойствах, имеющиеся в отечественной и зарубежной литературе по данной тематике с глубиной поиска 30 лет по конец 2010 года включительно. БД содержит информацию по более чем 200 современным никелевым СС, используемым для получения отливок. Для каждого СС указаны концентрации основных ЛЭ и примесей, физико-механические свойства, технологические и эксплуатационные характеристики, а также источники, из которых взята информация.

На основе анализа статистической информации, содержащейся в БД была разработана классификация ЛЭ по их влиянию на свойства литейных никелевых СС по их положению в периодической системе Д. И. Менделеева, т. к. описанные в литературе классификации не позволяли однозначно определить влияние элемента на то или иное свойство. Были выделены 3 группы ЛЭ:

1. положительно влияющие на физико-механические свойства – элементы IIA-VIIA подгруппы, и некоторые элементы VIIIA и III-IVB подгруппы;

2. положительно влияющие на коррозионную стойкость и биосовместимость – элементы IIIA-VIIIA подгруппы и некоторые элементы IIA, IB-IVB подгруппы;

3. положительно влияющие на литейные свойства – элементы IIA-IIIА, IB подгруппы и некоторые элементы IVA, VA, VIIIA, IIB-VB подгруппы.

Для определения оптимальных диапазонов содержания ЛЭ в литейных никелевых СС были построены гистограммы распределения никелевых СС. Основным классификационным признаком при построении диаграммы являлись величины свойств литейных никелевых СС, а вспомогательным количество СС в БД, принадлежащим соответствующему интервалу концентраций ЛЭ.

На основе проведенного анализа произведен выбор основных ЛЭ, определяющих свойства литейных никелевых СС, а также определены диапазоны концентраций, при которых литейные никелевые СС будут обладать комплексом максимальных свойств.

На основе комплексного использования метода ИНС для расчета математической

модели влияния ЛЭ на предел текучести никелевых СС и методе сопряженных градиентов, для нахождения экстремума свойств, была разработана методика синтеза новых литейных никелевых СС.

С использованием разработанной методики разработаны 24 математические модели, описывающие влияние концентраций основных ЛЭ на предел текучести литейных никелевых СС.

Разработана методика селекции математических моделей, которая позволяет достоверно оценить адекватность и прогностические свойства модели. Методика основана на сравнении 4 показателей адекватности и прогнозировании математических моделей: параметр Бокса-Ветца, дисперсия адекватности, коэффициент детерминации и средняя относительная ошибка аппроксимации.

На основе разработанной методики селекции была выбрана наиболее адекватная и лучшая по прогностическим возможностям математическая модель влияния концентрации ЛЭ на предел текучести литейных никелевых СС.

С использованием выбранной математической модели методом сопряженных гра-

диентов по поверхности отклика определен состав литейного никелевого СС имеющего прогнозируемый предел текучести $\sigma_{0,2} = 941,144$ МПа.

Разработанный с помощью методов математического моделирования, синтезированный сплав исследовался на физико-механические, коррозионные и литейные показатели. Свойства разработанного сплава сравнивались с аналогичными характеристиками серийного СС.

Выплавка заготовок разработанного сплава производили в производственных условиях с применением стандартных технологий и шихты.

Для возможности сравнения свойств разработанного и серийного сплава были отлиты методом литья по выплавляемым моделям образцы для испытаний на физико-механические свойства: предел текучести с остаточной деформацией 0,2 %, предел временного сопротивления, относительное удлинение, твердость по Виккерсу, коэффициент термического расширения, коррозионная стойкость. Результаты испытаний представлены на рисунках 2, 3, 4. Также на рисунке 5 представлена микроструктура образцов сплавов.

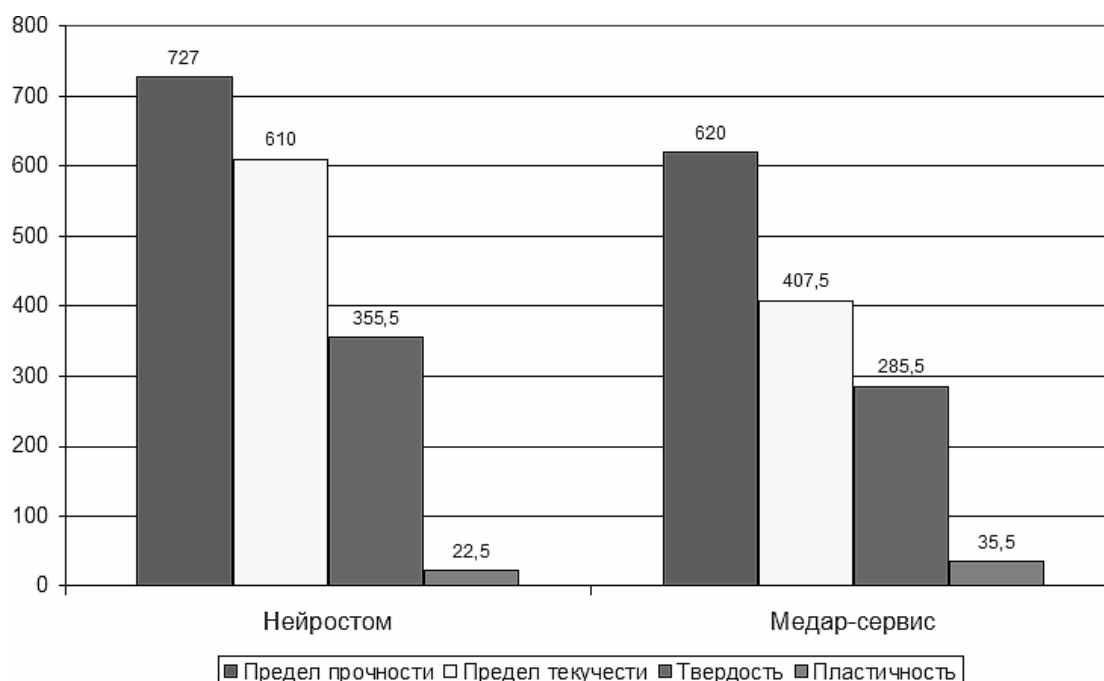


Рисунок 2 – Результаты испытаний на механические свойства разработанного (Нейростом) и серийного (Медар-сервис) сплавов

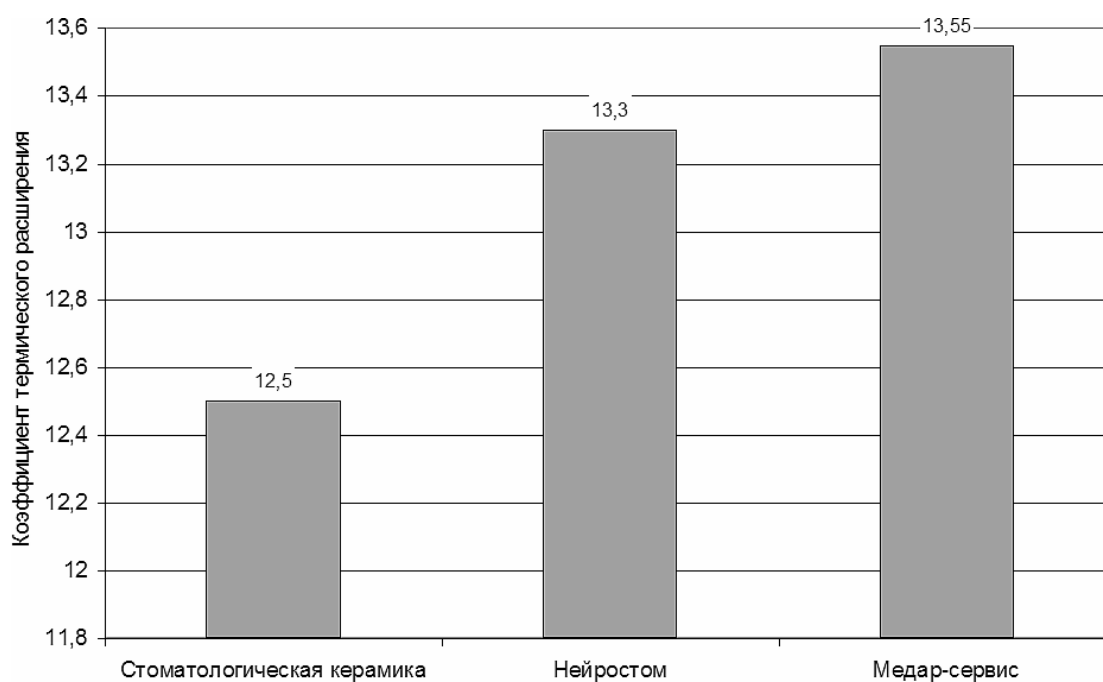


Рисунок 3 – Результаты испытаний на коэффициент термического расширения разработанного (Нейростом) и серийного (Медар-сервис) сплавов

Сравнительное исследование литейных свойств разработанного и серийного сплава проводили на оболочковых формах-пробах, аналогичных по конфигурации малой комплексной пробе для испытания цветных металлов (проба Купцова-Нехендзи). Проба по-

зволяет одновременно определить жидкотекучесть, степень поражения трещинами, объем усадочных пороков и литейную усадку. Оболочковые формы пробы изготавливали по выплавляемым моделям (таблица 1).

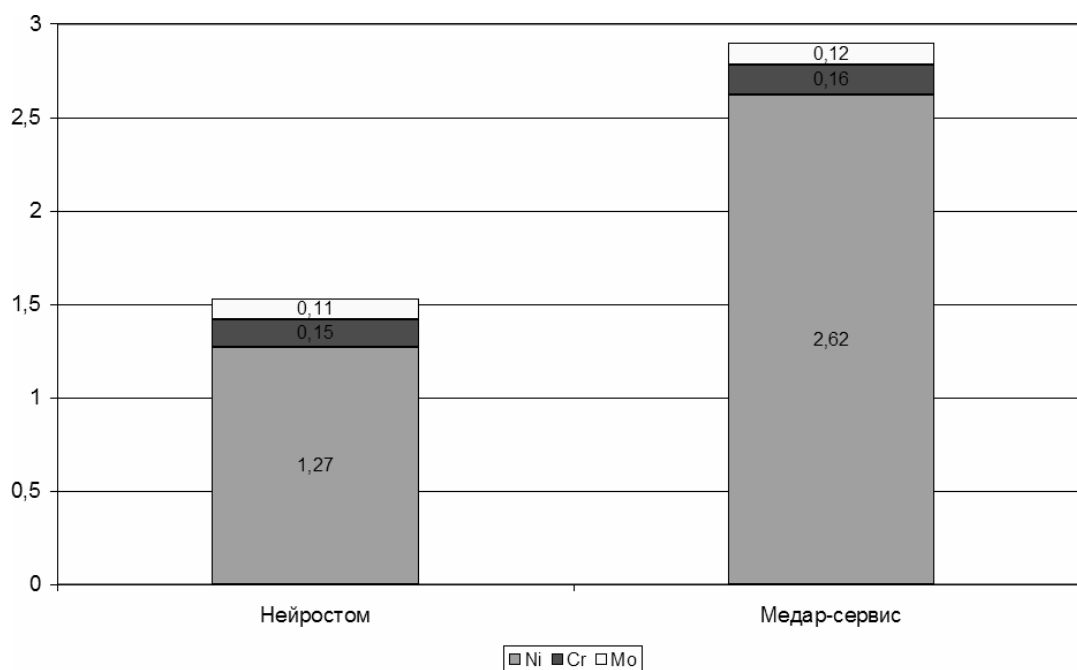


Рисунок 4 – Результаты испытаний на коррозионную стойкость разработанного (Нейростом) и серийного (Медар-сервис) сплавов

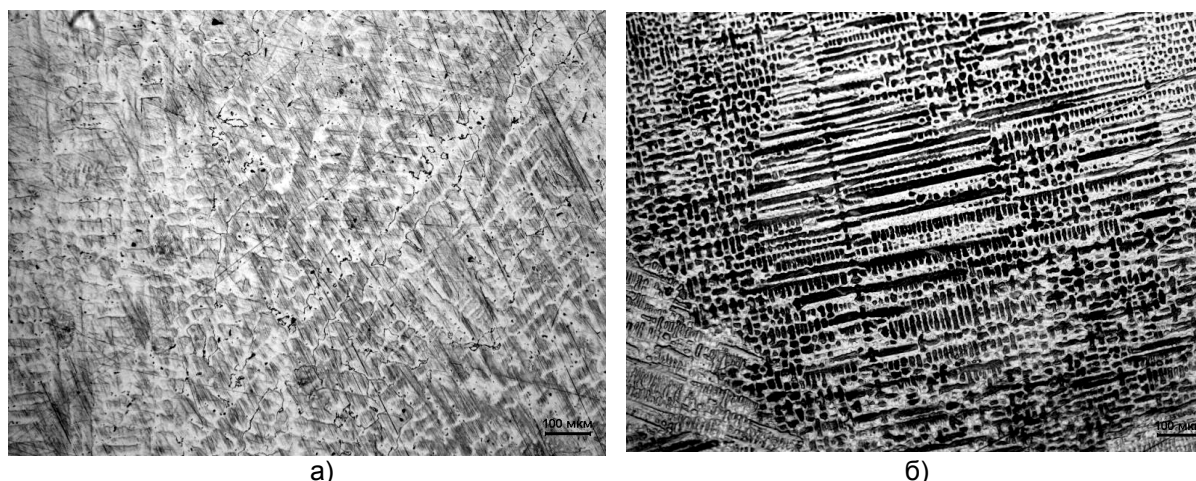


Рисунок 5 – Микроструктура разработанного (а) и серийного (б) сплавов (×100)

Таблица 1 – Результаты испытаний на литейные свойства разработанного (Нейростом) и серийного (Медар-сервис) сплавов по пробе Купцова-Нехендзи

	Разработанный сплав	Серийный сплав
Жидкотекучесть, мм	376	369
Сумма длин трещин, мм	2,66	3,11
Склонность к образованию усадочных пороков: - концентрированная усадочная раковина, % - объем усадочных пор, %	1,54 2,79	1,69 2,86
Линейная усадка, %	2,13	2,17

Сопоставление разработанного СС и его серийного аналога показало, что разработанный сплав имеет более высокие физико-механические показатели с одновременным сохранением хороших литейных свойств. Кроме того, разработанный сплав по сравнению с серийным имеет упорядоченную структуру без явно выраженной дендритной структуры.

Таким образом, разработанная методика синтеза сплавов с применением интеллектуальных математических методов позволяет помимо гарантированного достижения результатов, в 4-5 раз сократить сроки разработки новых сплавов, снизить в 40-50 раз трудозатраты на разработку новых материалов и сэкономить в 10-20 раз дефицитные и дорогостоящие материалы.