

МЕТОДИКА АНАЛИТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА СТОМАТОЛОГИЧЕСКИХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

А.А. Ганеев, Е.Ф. Шайхутдинова, Н.А. Федорова

В современной ортопедической стоматологии для замещения отсутствующих или поврежденных тканей зуба используются различные конструкционные материалы, из которых наиболее приемлемыми являются металлы и их сплавы.

Однако не все используемые сплавы отвечают всем требованиям ортопедической стоматологии, таким как:

- коррозионная устойчивость;
- биологическая совместимость;
- механическая прочность;
- совместимость с керамикой;
- технологичность;
- невысокая стоимость.

Анализ отечественных и зарубежных печатных и электронных изданий показал, что современные стоматологические сплавы можно разделить на две группы:

- 1) сплавы на основе благородных металлов;
- 2) сплавы на основе неблагородных металлов.

Сплавы на основе благородных металлов (золота, платины, серебра) в недавнем прошлом были широко распространены, однако кроме недостаточной прочности, твердости и пониженной износостойкости, они имеют весьма существенный недостаток – высокую стоимость.

В связи с этим в настоящее время большое распространение получили сплавы на основе неблагородных металлов. Наиболее перспективными из них являются сплавы на основе никеля и кобальта. Они обладают достаточной прочностью, пластичностью, коррозионной устойчивостью, биологической совместимостью и имеют относительно низкую стоимость. Однако кобальтовые сплавы имеют высокую температуру плавления, большую усадку и низкую жидкотекучесть, кроме того высокая твердость затрудняет механическую обработку отливки, а соединение металла с керамикой имеет более низкую прочность по сравнению с никелевыми сплавами.

Таким образом, наиболее перспективным направлением развития производства высококачественных и недорогих зубных протезов являются сплавы на основе никеля.

Однако за последние десятилетия новых сплавов этого типа было мало разработано, а повышающиеся требования к материалу и конструкции протезов не позволяют использо-

вать устаревшие сплавы. Поэтому необходимы новые сплавы с более высокими физико-механическими и технологическими свойствами.

Традиционные методы синтеза сплавов имеют ряд недостатков. Прежде всего это большие временные и материальные затраты, вызванные необходимостью проведения большого количества экспериментов.

В данной работе синтез сплавов ведется на основе метода компьютерного проектирования, который уменьшает количество плавок и позволяет использовать имеющиеся экспериментальные данные — пассивного эксперимента, принципиальная схема которого представлена на рисунке 1.

На данный момент, не существует сколько-нибудь полной, надлежащим образом собранной и отработанной информации по ортопедическим никелевым сплавам, применяемым в зуботехнике. В тоже время данная информация имеет важное практическое значение и может послужить основой для серьезных научных разработок в области математического моделирования многокомпонентных никелевых сплавов в стоматологии и, в конечном счете, синтеза новых ортопедических сплавов с помощью методов ТРО и ЭВМ.

Разработка база данных состоит из подэтапов: выбор архитектуры системы управления базой данных и разработка структуры базы данных. База данных разработана на основе собранного на естественном языке банка данных по отечественным и зарубежным стоматологическим сплавам по июнь 2004 года.

Разработанная база данных учитывает специфику материалов, применяемых в зуботехнике.

На этапе проектирования информационно-поисковой системы был выделен ряд функциональных задач, который можно свести к двум основным:

- корректировка данных;
- поиск данных по разработанным критериям.

В качестве схемы управления модулями информационно-поисковой системы была принята иерархическая система меню. В качестве схемы доступа к базе данных была принята схема прямого доступа. Структура базы данных и информационно-поисковой системы приведена на рисунке 2.



Рисунок 1 – Принципиальная схема синтеза сплава

На основе реализованной базы данных проведены статистические исследования с целью построения математической модели сплава.

Исследование влияния легирующих элементов на основные свойства сплавов проводилось на основе статистической обработки данных. Для оценки влияния легирующих элементов на физико-механические свойства никелевых сплавов использован метод регрессионного анализа.

В основе анализа лежит так называемый “черный ящик” Н. Винера, где в качестве входных параметров x используются легирующие элементы, а в качестве выходных z – физико-механические свойства никелевых стоматологических сплавов.

Зависимость между двумя случайными событиями проявляется в том, что условная вероятность одного из них при наступлении

другого отличается от безусловной вероятности. Аналогично, влияние одной случайной величины на другую характеризуется условными распределениями первой при фиксированных значениях второй.

Пусть для каждого значения ξ случайной величины Z определено условное математическое ожидание $z(x) = E(Z|\xi = x)$ случайной величины Z . Функция $z(x)$ называется регрессией величины Z по ξ , а ее график – линией регрессии Z по ξ . Зависимость Z от ξ проявляется в изменении средних значений Z при изменении ξ , хотя при каждом фиксированном значении $\xi=x$ величина Z остается случайной величиной с определенным рассеянием.

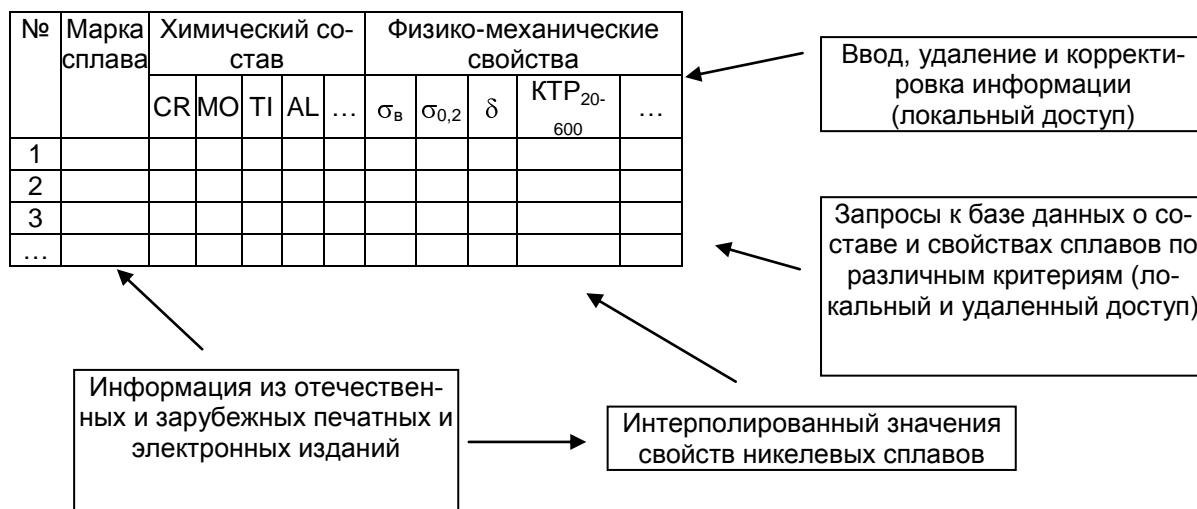


Рисунок 2 – Структура базы данных и информационно-поисковой системы

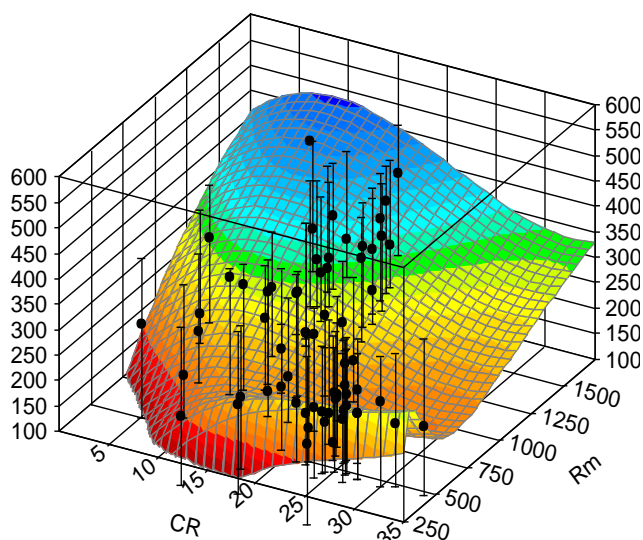


Рисунок 3 – Зависимость твердости и предела прочности ортопедического никелевого сплава от содержания хрома

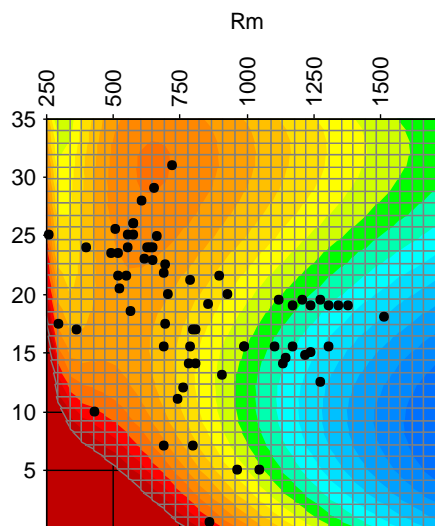


Рисунок 4 – Изолинии зависимости твердости и предела прочности ортопедического никелевого сплава от содержания хрома

Rank 13 Eqn 316 $z = a + bx + c/y + dx^2 + e/y^2 + fx/y + gx^3 + h/y^3 + ix/y^2 + jx^2/y$
 $r^2=0,58411014$ DF Adj $r^2=0,50984409$ FitStdEn=59,274725 Fstat=8,8950573,

где $z = a + bx + c/y + dx^2 + e/y^2 + fx/y + gx^3 + h/y^3 + ix/y^2 + jx^2/y$ – уравнение регрессии описывающее зависимость твердости и предела прочности ортопедического никелевого сплава от содержания хрома; r^2 – коэффициент детерминации; Fstat – критерий Фишера.

В нашем случае, в качестве переменной z выступают физико-механические свойства сплава (σ_B , $\sigma_{0,2}$, HV10, δ , KTP₂₀₋₆₀₀), а в качестве переменной x_1 , x_2 – содержание легирующего элемента в сплаве.

В общем случае уравнение регрессии влияния легирующих элементов на физико-механические свойства никелевых ортопедических сплавов имеет вид:

$$z(x_1, x_2) = E(Z | \xi_1 = x_1, \xi_2 = x_2)$$

В работе использован метод всех возможных регрессий, который заключается в полном переборе наиболее применимых к описанию уравнений. В нашем случае используются следующие классы математических зависимостей:

- полиномиальные функции

$$z(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=0}^m \beta_{ij} \cdot x_i^k \cdot \ln^l(x_j),$$

где $k, l = -5, \dots, 5$;

- рациональные функции

$$z(x_1, x_2) = \frac{z_1(x_1, x_2)}{z_2(x_1, x_2)},$$

где z_1 и z_2 — полиномиальные функции;

- нелинейные лоренцевы функции

$$z(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^2 \left[\sum_{j=0}^m \alpha_{ij} x_i^j + \frac{\beta_{i1}}{1 + \left(\frac{x_i - \beta_{i2}}{\beta_{i3}} \right)^2} \right] + \frac{\gamma_0}{\prod_{i=1}^2 \left[1 + \left(\frac{x_i - \gamma_{i1}}{\gamma_{i2}} \right)^2 \right]}$$

и некоторые другие.

В приведенных выше уравнениях используются обозначения:

α, β, γ — коэффициенты уравнения регрессии; m — число слагаемых в ряду; $m = 0, \dots, 5$.

Общее число функций, выбранных для рассмотрения, составило порядка 64000.

Для всех рассматриваемых уравнений по методу наименьших квадратов производился расчет коэффициентов уравнений. Затем для всех сплавов, вошедших в исходную выборку, по известным значениям ξ_1 и ξ_2 для каждого уравнения регрессии были рассчитаны предполагаемые значения физико-механических свойств сплавов. Эти значения сравнивались с фактическими, и по результатам сравнения уравнения регрессии были проранжированы по следующим критериям:

- по критерию Фишера;
- по коэффициенту детерминации;
- по дисперсии относительно уравнения регрессии, для уравнений регрессии с одинаковыми значениями критериев Фишера и коэффициентов детерминации.

Вид зависимости между величинами z , ξ_1 , ξ_2 имеет вид уравнения регрессии, оказавшегося на первом месте в проранжированном списке уравнений. На рисунках 3 и 4 показано влияние хрома на твердость и предел прочности стоматологических никелевых сплавов. Аналогичные зависимости были получены для других легирующих элементов.

Адекватность выбранного уравнения регрессии гарантируется методикой ранжирования уравнений, согласно которой на первом месте в проранжированном ряду оказывается уравнение регрессии, наиболее адекватное по критерию Фишера, коэффициенту детерминации и несмещенной оценке среднего квадрата ошибки предсказания.

В результате расчетов был получен состав нового сплава. Исследования показали, что полученный сплав имеет более высокие физико-механические характеристики, чем существующие аналоги.

Предложенная методика синтеза никелевых стоматологических сплавов 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.

Уфимский государственный авиационно-технический университет