

**На правах рукописи**

**НУРГАЯНОВА Ольга Сергеевна**

**АВТОМАТИЗИРОВАННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ  
ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ  
НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА**

**Специальность 05.13.12**

**Системы автоматизации проектирования**

**АВТОРЕФЕРАТ**

**диссертации на соискание ученой степени**

**кандидата технических наук**

**Уфа 2006**

Работа выполнена в ГОУ ВПО  
Уфимский государственный авиационный технический университет  
на кафедре машин и технологии литейного производства

Научный руководитель

д-р техн. наук, проф.  
**Ганеев Альмир Амирович**

Официальные оппоненты

д-р техн. наук, проф.  
**Куликов Геннадий Григорьевич**

канд. техн. наук, доц.  
**Ибатуллина София Мухамедовна**

Ведущая организация  
**ное**

**ОАО «Уфимское моторостроитель-  
производственное объединение»**

Защита состоится 28 декабря 2006 г. в 10:00 часов  
на заседании диссертационного совета Д-212.288.03  
при Уфимском государственном авиационном техническом университете  
по адресу: 450000, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. К. Маркса, 12

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета

Автореферат разослан 25 ноября 2006 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
д-р техн. наук, проф.

**В.В. Миронов**

**НУРГАЯНОВА Ольга Сергеевна**

**АВТОМАТИЗИРОВАННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ  
ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ  
НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА**

**Специальность 05.13.12**

**Системы автоматизации проектирования**

**АВТОРЕФЕРАТ**

**диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук**

Подписано к печати 24.11.2006. Формат 60x84 1/16.  
Бумага офсетная. печать плоская. Гарнитура Таймс.  
Усл. печ. л.1,0. Уч.-изд. л. 0,9.  
Тираж 100 экз. Заказ № 597.

ГОУВПО Уфимский государственный авиационный технический университет  
Центр оперативной полиграфии  
450000, Уфа-центр, ул. К.Маркса,12

**ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

*Актуальность темы исследования.* Разработка методов синтеза новых жаропрочных материалов составляет одну из важнейших проблем развития авиационного турбореактивного двигателестроения. Существующие методы поиска состава новых сплавов с требуемыми свойствами, основанные на эмпирическом опыте, являются весьма трудоемкими и включают многократные выплавки опытных образцов с последующим испытанием их на механические свойства. Условия рыночной

экономики и дороговизна некоторых необходимых легирующих элементов определяют необходимость разработки и применения более экономных методов автоматизированного проектирования сплавов. В современном материаловедении литейные никелевые *жаропрочные сплавы* (ЖС) являются наиболее сложными по составу легирующих элементов. Однако, большое число легирующих элементов, сложный механизм легирования в жаропрочных никелевых сплавах определяют малую эффективность большинства существующих расчетных методов, позволяющих производить лишь качественный анализ, который исключает определение прямой связи между жаропрочностью и составом сплавов. В то же время свойства наиболее распространенных лопаточных сплавов ЖС26 и ЖС32, имеющие пределы 100-часовой длительной прочности при 1000 °С не более 200...255 МПа, уже не удовлетворяют современным условиям эксплуатации турбинных двигателей в связи с требованиями значительного увеличения ресурса и повышения рабочей температуры. Таким образом, необходимы эффективные методы автоматизированного проектирования ЖС с лучшим комплексом свойств, позволяющие ускорить и упростить научный поиск, а также предполагающие более рациональное использование всевозможных ресурсов.

Что касается *задачи синтеза сплавов* (термин, предложенный Б.Б. Гуляевым, подразумевает создание сплава, обладающего требуемым комплексом физико-механических свойств), то её особенности заключаются в том, что неизвестны аналитические зависимости свойства от химического состава или последовательности действий, приводящие к приемлемой аналитической зависимости, а исходные данные отличаются неполнотой, противоречивостью и искажениями. Во-первых, это связано с практической неосуществимостью построения полной количественной теории влияния легирующих элементов (ЛЭ) и образуемых ими соединений на структуру и свойства сплавов. Во-вторых, исследуемое признаковое пространство имеет достаточно высокую размерность, поскольку в составе никелевых ЖС может присутствовать до 12...15 основных ЛЭ, не считая полезных микродобавок и вредных примесей, значимо влияющих на жаропрочность. Поэтому работы в области автоматизации проектирования сплавов являются весьма актуальными.

В основу разработок, выполненных в диссертации, были положены работы отечественных и зарубежных ученых: Б.Б. Гуляева, Р.Е. Шалина, Е.Н. Каблова, А.А. Ганеева, Д.В. Попова, Л.Ф. Павленко, Р.Р. Ртищева, Н. Харады, Р.У. Флойда, Ч. Симса, Н. Юкавы и др.

*Целью диссертационной работы* является разработка системы автоматизированного проектирования для синтеза никелевых жаропрочных сплавов с монокристаллической структурой, на основе методов искусственного интеллекта.

Для достижения цели были поставлены и решены следующие *задачи*:

1. Разработать методику автоматизированного проектирования для синтеза никелевых ЖС на основе методов искусственного интеллекта.

2. Разработать базу данных (БД) по современным литейным никелевым ЖС с монокристаллической структурой для представления информации о составе и свойствах сплавов в систематизированном виде.

3. Разработать метод восстановления недостающей информации в БД о свойствах литейных никелевых ЖС.

4. Разработать математические модели (ММ) влияния ЛЭ на жаропрочность никелевых сплавов с монокристаллической структурой для оптимизации состава нового сплава.

5. Разработать систему автоматизированного проектирования для синтеза ЖС на основе ММ влияния ЛЭ на жаропрочность, полученных методами искусственного интеллекта.

6. Провести экспериментальную оценку эффективности разработанной методики автоматизированного проектирования сплавов.

**Объект и предмет исследования.** Объектом исследования данной диссертационной работы являются литейные никелевые ЖС с монокристаллической структурой. Предмет исследования – математическое обеспечение для автоматизированного проектирования литейных жаропрочных никелевых сплавов с монокристаллической структурой.

**Методы исследования.** В работе использовались принципы и методы системного анализа, методологий структурного и объектно-ориентированного анализа и проектирования информационных систем, математической статистики, интеллектуального анализа данных, методы искусственного интеллекта и физико-химического анализа.

***На защиту выносятся:***

1. Методика автоматизированного проектирования литейных никелевых ЖС на основе методов искусственного интеллекта.

2. Тематическая БД по современным никелевым ЖС для отливок с направленной и монокристаллической структурой.

3. Метод восстановления недостающей информации в БД о свойствах литейных никелевых жаропрочных сплавов.

4. Математические модели влияния легирующих элементов на жаропрочность литейных никелевых ЖС с монокристаллической структурой.

5. Алгоритмическое и программное обеспечение автоматизированного проектирования литейных никелевых ЖС.

6. Результаты оценки эффективности разработанной методики автоматизированного проектирования сравнением физико-механических и литейных свойств синтезированного сплава со свойствами серийного сплава ЖС32.

**Научная новизна** работы состоит в следующем:

1. Разработана методика автоматизированного проектирования никелевых ЖС с монокристаллической структурой на основе методов искусственного интеллекта, которая, в отличие от известных методов активного планирования эксперимента, позволяет значительно сократить число опытных плавок.

2. Разработана специализированная БД по литейным никелевым ЖС с монокристаллической структурой на основе использования OLAP-технологии, что обеспечивает высокоэффективные средства доступа к данным.

3. Разработан метод восстановления недостающих свойств литейных никелевых ЖС, который в отличие от сплайн-интерполяции свободен от проблемы выбора узлов и разбиения на группы в случае нерегулярных данных.

4. Математические модели влияния ЛЭ на жаропрочность, построенные по статистическим данным, в которых учитывается наличие в сплавах упрочняющих фаз и влияние сложных соединений на жаропрочность.

**Практическая значимость и внедрение результатов работы.**

1. Разработана новая методика проектирования литейных никелевых ЖС с использованием априорной информации о составе и свойствах известных сплавов, которая за счет использования средств автоматизированного проектирования, позволяет сэкономить расход дорогостоящих материалов.

2. Разработано алгоритмическое и программное обеспечение для автоматизированного проектирования никелевых ЖС, позволяющее в 4...5 раз сократить сроки создания новых многокомпонентных ЖС.

3. На основе полученных ММ рассчитан химический состав нового многокомпонентного высокожаропрочного никелевого сплава УГАТУ-5, предназначенного для получения отливок с монокристаллической структурой, который, в сравнении с серийным сплавом ЖС32, обладает более высокими жаропрочными, механическими и литейными свойствами.

4. Рабочая версия тематической БД по никелевым ЖС и разработанное программное обеспечение внедрены на ОАО УМПО и в НИЧ УГАТУ. Практические результаты исследований внедрены в учебный процесс УГАТУ в виде лабораторных работ «Математическое моделирование зависимостей типа «состав-свойство» и проверка их адекватности» по дисциплине «Основы автоматизированного проектирования», «Теория формирования отливки», «Основы затвердевания отливки» направления подготовки дипломированных специалистов 651400 (150200) «Машиностроительные технологии и оборудование».

**Апробация работы.** Основные положения, представленные в диссертационной работе, были доложены и обсуждены на следующих конференциях: Международная молодежная научно-техническая конференция «Интеллектуальные системы управления и обработки информации» (Уфа, 2003); «International Workshop on

Computer Science and Information Technologies» (Уфа, 2003); II-ая всероссийская научная конференция «Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB» (Москва, 2004); Международная научно-практическая конференция «Проблемы и перспективы развития литейного, сварочного и кузнечно-штамповочного производств» (г. Барнаул, 2004, 2005, 2006); II-ая всероссийская научно-техническая конференция «Искусственный интеллект в XXI веке» (Пенза, 2004); Международная научно-техническая конференция «Компьютерное моделирование» (Санкт-Петербург, 2004, 2005); региональная зимняя школа-семинар аспирантов и молодых ученых «Интеллектуальные системы управления и обработки информации» (Уфа, 2006); II-ая научно-техническая конференция молодых специалистов, посвященная годовщине образования ОАО УМПО (Уфа, 2006).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 15 научных работ, в том числе 14 статей в тематических сборниках и сборниках трудов научно-технических конференций международного и российского значения, из них 1 статья в периодическом издании, входящем в перечень ВАК, получены 2 свидетельства об официальной регистрации программ для ЭВМ.

**Структура работы.** Диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы, включающего 160 наименований и приложений. Содержание работы изложено на 157 страницах.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность темы диссертации и приведена общая характеристика работы, формулируются цели и задачи исследования, перечисляются методы исследования, приводятся результаты, выносимые на защиту, отмечается их новизна и практическая значимость.

**В первой главе** проведен обзор и анализ методов проектирования многокомпонентных сплавов. Рассмотрены основные тенденции развития и особенности легирования никелевых ЖС. Отмечается неоднозначность информации по оценке влияния ЛЭ на жаропрочность никелевых ЖС и нерешенность на сегодняшний день задачи синтеза ЖС, способных выдерживать значительные нагрузки при рабочей температуре 1000 °С. Показано, что отсутствуют универсальные методы синтеза, которые сочетали бы в себе строгий научный подход традиционных методик с преимуществами применения современной вычислительной техники. На основе проведенного анализа применимости методов синтеза сплавов для проектирования никелевых ЖС, пригодных для получения отливок с направленной и монокристаллической структурой, сформулированы цель и основные задачи диссертации. Определено научное направление решения указанной проблемы, включающее разработку системы автоматизированного проектирования для синтеза никелевых ЖС для отливок с направленной и монокристаллической структурой на основе методов

искусственного интеллекта. Для решения поставленной задачи приводится общая схема методики автоматизированного проектирования сплавов на основе методов искусственного интеллекта, представленная на рисунок 1.

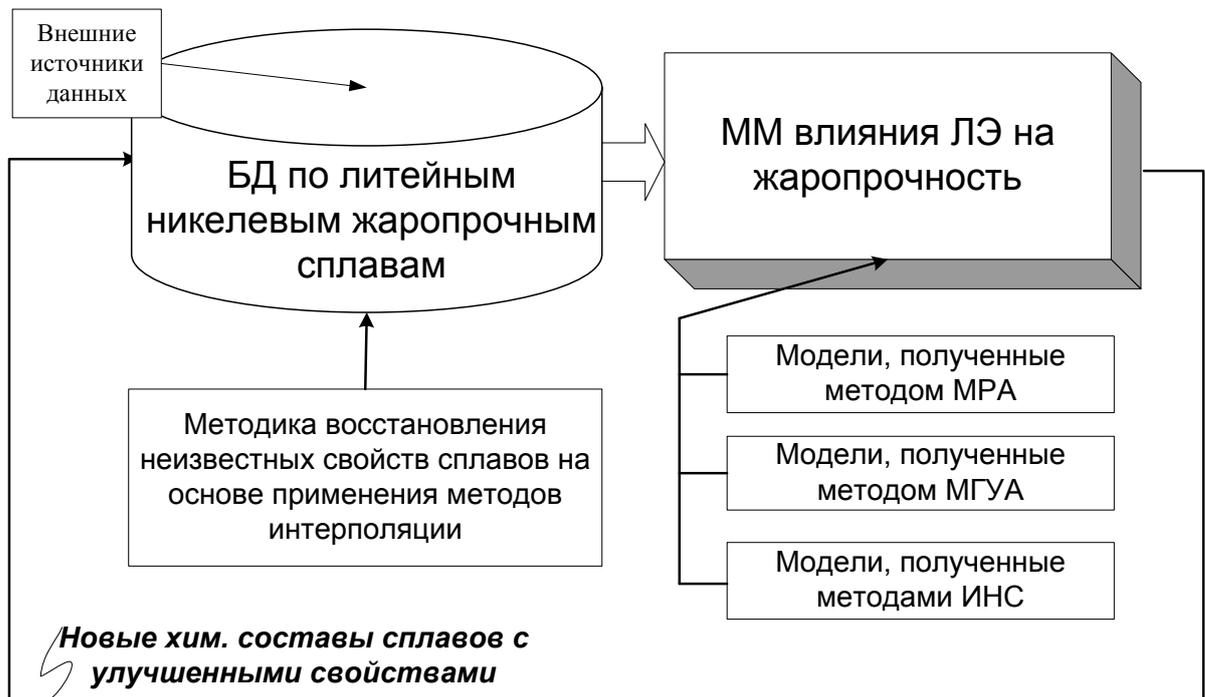


Рисунок 1. Общая схема методики автоматизированного проектирования сплавов

Методика автоматизированного проектирования сплавов на основе методов искусственного интеллекта заключается непосредственно в разработке математических моделей влияния ЛЭ на жаропрочность и поиске экстремума свойства. С точки зрения построения математических моделей «состав-свойство» был рассмотрен ряд методов – это методы распознавания образов, множественного регрессионного анализа (МРА) и интеллектуальные методы – МГУА и ИНС. Методы распознавания образов эффективны лишь на первоначальном этапе исследования – когда есть необходимость группировки данных по какому-то признаку, например, в МГУА при формировании обучающей и контрольной выборок, где сплавы с максимальными свойствами могут использоваться для проверки модели на заключительном этапе алгоритма. Таким образом, для решения данной задачи выбор был определен в пользу методов МРА и искусственного интеллекта, комплексное применение которых наиболее эффективно в условиях частой неопределенности, зашумленности и значительной размерности массива исходных данных.

*Во второй главе* описывается первый этап общей методики автоматизированного проектирования сплавов, который включает в себя разработку информационного обеспечения, а именно, разработку специализированной БД по жаропрочным никелевым сплавам с монокристаллической структурой – разработку моделей предметной области, разработку логической модели данных, разработку физической модели данных, разработку собственно БД глубиной поиска 45 лет, которая охватывает

сведения о составе более чем 200 сплавов, их механических (100- и 1000-часовые значения жаропрочности в диапазоне температур от 750 до 1200 °С, удельная жаропрочность, рабочие температуры) и физических (плотность, электронная концентрация) свойствах, области применения и методах изготовления жаропрочных никелевых сплавов с монокристаллической структурой. Для решения этой задачи при разработке системы автоматизированного проектирования ЖС была использована OLAP-технология. При этом OLAP-технология используется не только как гибкое средство анализа данных, накапливаемых в системе, но и как удобный способ подготовки входной многомерной информации для решения задачи моделирования влияния химического состава на жаропрочность (рисунок 2).

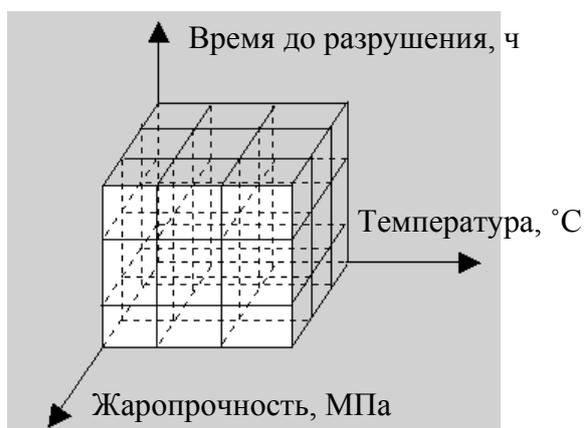


Рисунок 2. Пример многомерного куба

В силу того, что у отечественных и зарубежных производителей значения жаропрочностей приводятся при различных температурах, что обуславливается различными методами анализа сплавов, выборки сплавов по значению жаропрочности при различных температурах получаются небольшие и неrepresentative. Наличие таких выборок существенным образом будет отражаться на прогнозируемых составах и свойствах сплавов, поскольку разброс любого прогноза на узком участке является показателем его невысокой достоверности. Таким образом, возникает задача наполнения БД сведениями о свойствах сплавов.

С целью приведения свойств к единым температурным интервалам используются математические методы для восстановления пропущенных данных. Так, если у сплава известны значения жаропрочности при температурах 900 и 1000 °С, то можно проинтерполировать значение жаропрочности при 926, 950 и 982 °С. Анализ методов интерполяции (полиномы Эрмита, Лагранжа, Ньютона, Стирлинга, Эверетта, сплайны) и проведенные вычислительные эксперименты показали, что наиболее эффективным и достоверным методом интерполяции является метод на основе случайных функций, который, по сравнению со сплайн-интерполяцией, свободен от проблемы выбора узлов и разбиения на группы в случае нерегулярных данных. Для формального выбора лучшего метода интерполяции был сформулирован кри-

терий оптимальности: лучшим считался тот метод, которому соответствовало минимальное значение средне квадратического отклонения (СКО) из рассматриваемых значений, соответствующих выборкам с наибольшими относительными отклонениями по каждому методу:

$$i_{opt} = \arg \min_i \max_j \sqrt{\frac{1}{n_{V_{nj}}} \sum_{x \in V_{nj}} \left( y - Y_{V_{oj}}^i(x) \right)^2 / \sum_{y \in V_{nj}} y^2}, \quad (1)$$

где  $V_n$  – проверочная выборка,  $n_{V_n}$  – длина проверочной выборки,  $x \in V_n$  – значения рабочих температур из проверочной выборки,  $y$  – известные значения жаропрочности, соответствующие значениям  $x$ ;  $Y_{V_o}^{k_x, k_y}$  – интерполируемые значения жаропрочности, полученные из обучающей выборки  $V_o$  в соответствующих шкалах температуры ( $k_x$ ) и жаропрочности ( $k_y$ ).

Проценты средних квадратичных отклонений (СКО) прогнозируемых значений от фактических рассчитывались по формуле:

$$S_{V_n}^{\%} = \frac{S_{V_n}}{\sqrt{\sum_{x \in V_n} y^2}} * 100\%. \quad (2)$$

Проведение интерполяции позволило достичь увеличения исходной выборки на 16,3%, рисунке 3.

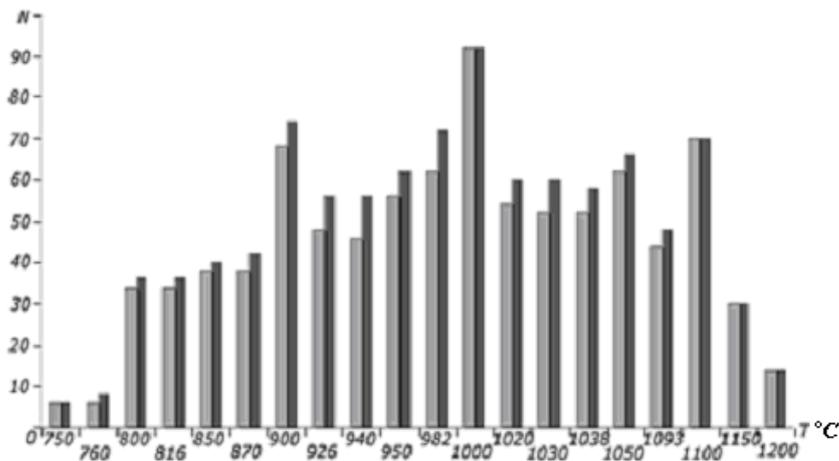


Рисунок 3. Распределение числа сплавов по температурам до и после проведения интерполяции (светлый и темный цвет соответственно),  $T$  – рабочая температура °C,  $N$  – количество сплавов

Представление сведений по жаропрочным сплавам в систематизированном виде и полнота соответствующей информации по свойствам является необходимым для построения математических моделей влияния ЛЭ на жаропрочность.

**Третья глава** посвящена разработке математического обеспечения для автоматизированного проектирования литейных никелевых ЖС. Основным этапом автоматизированного проектирования жаропрочных никелевых сплавов является структурно-параметрическая идентификация ММ влияния концентраций легирующих элементов на жаропрочность.

Проверка на непротиворечивость гипотезе нормального распределения исходных данных, проводимая с помощью критерия согласия, основанном на расчете асимметрии и эксцесса, показала, что гипотеза о нормальности распределения верна.

Построение математических моделей изучаемого объекта – жаропрочных сплавов  $Y = f(x_1, x_2, \dots, x_m, X_1, X_2, \dots, X_n, T)$  основывается на базе собранного эмпирического материала, где  $Y$  – значение жаропрочности,  $(x_1, x_2, \dots, x_m)$  – химический состав сплава,  $(X_1, X_2, \dots, X_n)$  – интерметаллидные соединения,  $T$  – рабочая температура.

**Дано:** множество жаропрочных никелевых сплавов, описываемое набором признаков  $(x_1, x_2, \dots, x_m)$  – химический состав,  $Y$  – значения 100- или 1000-часовой жаропрочности при 900 °С, 1000 °С, 1100 °С.

**Требуется** получить математические зависимости «состав-свойство» типа

$$Y = f(x_1, x_2, \dots, x_m, X_1, X_2, \dots, X_n). \quad (3)$$

**Первый подход** к решению поставленной задачи основывается на применении МРА. Объект описывается линейным уравнением вида:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_m x_m, \quad (4)$$

где  $y$  – 100-часовая жаропрочность,  $(x_1, x_2, \dots, x_m)$  – химический состав,  $(a_0, a_1, \dots, a_m)$  – постоянные коэффициенты, определяемые решением системы линейных уравнений.

Несмотря на простоту уравнения (3), оно позволяет во многих случаях с приемлемой точностью моделировать зависимости «состав-свойство». Это объясняется следующими основными моментами: во-первых, суперпозиция данных, каждое из которых является недостоверным, позволяет получить достоверный результат, что в математической статистике объясняется векторным сложением случайных ошибок суммируемых параметров; во-вторых, адекватностью математического суммирования совместному действию множества факторов в реальных объектах.

Однако, одним из существенных недостатков данного метода является то, что ввиду малого значения коэффициентов  $a_i$ , фактор при нем считается несущественным и из модели исключается. Например, в ряде полученных моделей исключены оказались **Re, V**, хотя известно, что ренийсодержащие сплавы обладают наиболее высокими свойствами.

Модели, полученные МРА:

$$1. \sigma^{1000} = 86,14 \text{ Ni} + 86,64 \text{ Ir} + 96,96 \text{ Re} + 58,08 \text{ V} + 46,95 \text{ Hf} + 469,7 \text{ Zr} + 88,03 \text{ Ta} + 73,51 \text{ Nb} + 77,3 \text{ Al} + 78,78 \text{ Ti} + 87,86 \text{ W} + 89,8 \text{ Mo} + 87,56 \text{ Co} + 81,64 \text{ Cr} - 39,73 \text{ C} - 8335,25.$$

$$2. \sigma^{1100} = 260,22 \text{ Ni} + 257,43 \text{ Ir} + 272,9 \text{ Re} + 289,88 \text{ V} + 257,07 \text{ Hf} + 134,4 \text{ Zr} + 2621,2 \text{ Ta} + 256,4 \text{ Nb} + 264,9 \text{ Al} + 249,8 \text{ Ti} + 266,6 \text{ W} + 267,9 \text{ Mo} + 258,9 \text{ Co} + 265,9 \text{ Cr} + 105,7 \text{ C} - 26031,59.$$

Проверка данных регрессионных моделей на адекватность показала, что для 1-ой модели множественный коэффициент корреляции  $R=0,94$ , коэффициент детерминации  $R^2=0,89$ ; для 2-ой –  $R=0,93$ ,  $R^2=0,87$ .

Несмотря на достаточно высокие показатели адекватности, полученные модели плохо подходят для описания ЖС. Влияние **AlTi** и **NiNb** на жаропрочность, носит четко выраженный нелинейный характер, что видно из рисунка 4, *а* и *б*.

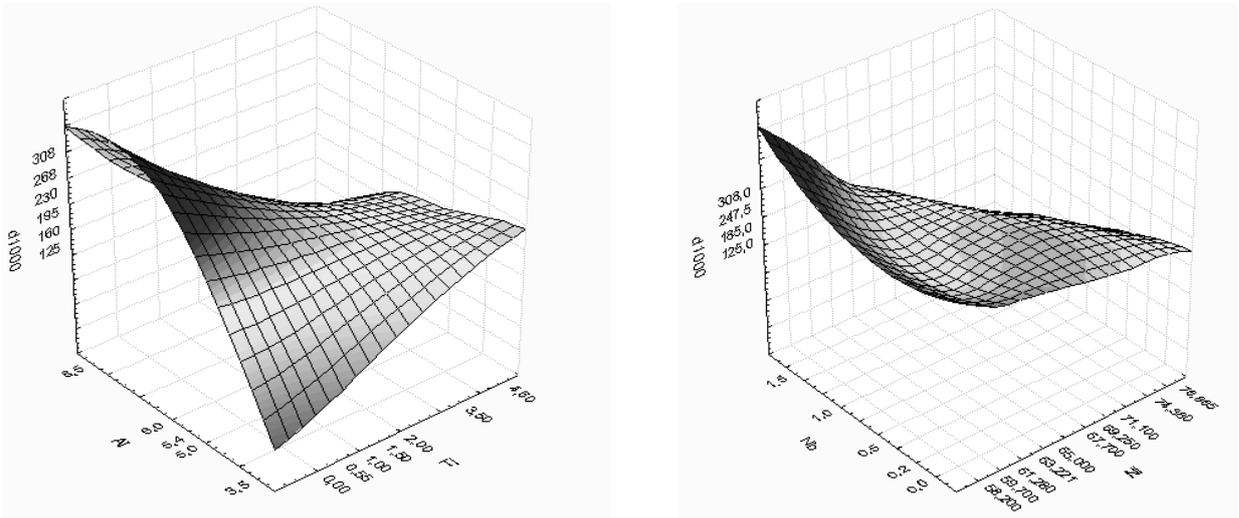
*а**б*

Рисунок 4. Зависимость 100-часовой жаропрочности при 1000 °С от содержания в сплаве *а* – **Al** и **Ti**; *б* – **Ni** и **Nb**

Из вышеизложенного видно, что модели, полученные классическими методами регрессионного анализа, даже если они по статистическим характеристикам являются значимыми, мало пригодны для целей прогнозирования, при этом отклонение между фактическим и расчетным значением жаропрочности достигает 5...23%.

**Второй подход**, основанный на МГУА, позволяет, устранив ряд недостатков метода множественной регрессии, получить более сложные модели с учетом влияния карбидов и интерметаллидных соединений. Моделирование осуществляется путём перебора различных моделей-претендентов по внешним критериям, при этом внешний критерий сначала уменьшается, проходя через точку минимума при оптимальной модели, после чего начинает возрастать в области переусложнённых моделей. Алгоритмы МГУА, согласно А.Г. Ивахненко, являются чрезвычайно помехоустойчивыми — при соотношении помеха/сигнал  $\theta = 20...30\%$  алгоритмы позволяют получить точную физическую модель и не теряют работоспособности вплоть до соотношения  $\theta = 300...400\%$ .

Перед началом работы алгоритма исходный массив данных случайным образом разбивается на два подмножества – обучающую и проверочную последовательности по значению рабочей температуры. МГУА используется для каждой последовательности. В работе использовались однорядные (комбинаторные) и многорядные схемы метода.

**Схема однорядного алгоритма МГУА** с использованием частных описаний квадратичного типа и критерием селекции

$$\bar{\varepsilon}_k^2 = \frac{1}{N_{np}} \sum_{i=1}^{N_{np}} (Y_i - Y_{ki})^2 \quad (5)$$

следующая:

**Шаг 1.** Из множества выходов  $X=(X_1, X_2, \dots, X_n)$  выбираются пары аргументов  $(X_i, X_j)$ , и составляются частные описания вида  $Y_k^{(1)} = \varphi(X_i, X_j), i \neq j, i, j = 1, \dots, N$ , при этом используются частные описания квадратичного типа:  $Y_k^{(1)} = a_0 + a_i X_i + a_j X_j + a_{ij} X_i X_j + a_{ii} X_i^2 + a_{jj} X_j^2$ .

**Шаг 2.** Используя метод наименьших квадратов (МНК) для каждого описания по обучающей выборке находятся оценки неизвестных коэффициентов  $\hat{a}_0, \hat{a}_i, \hat{a}_j, \hat{a}_{ij}, \hat{a}_{ii}, \hat{a}_{jj}$ .

**Шаг 3.** По критерию минимума  $\bar{\varepsilon}^2$  на проверочной последовательности отбираются  $F_1$  лучших  $F_1$  моделей, т.е. реализуется процедура селекции, при этом  $F_1 < M$ . Выходы этих моделей служат аргументами-входами для конструирования моделей второго ряда.

**Шаг 4.** Находится  $\bar{\varepsilon}^2(0) = \min_k \bar{\varepsilon}_k^2(0)$ .

**Шаг 5 (заключительный).** Двигаясь, таким образом, далее и делая последовательную замену переменных, вычисляются выражения для искомой модели в исходном пространстве описаний. Далее на проверочной выборке для каждой из этих моделей ищется оценка

$$\bar{\varepsilon}_s^2 = \frac{1}{N_{npov}} \cdot \sum_{i=1}^{N_{npov}} \{Y(k) - \hat{Y}_k^{(s)}\}^2, \quad (6)$$

где  $Y(k)$  – действительное значение выходное значение в  $k$ -той точке проверочной выборки;  $\hat{Y}_k^{(s)}$  – выходное значение в  $k$ -той точке проверочной выборки в соответствии с  $s$ -той моделью; и определяется  $F$  лучших моделей.

Модели, полученные при применении однорядной схемы МГУА:

1.  $\sigma^{1000} = 18,01 - 80,79V - 23,56Hf - 25,17Al - 5,84W - 17,64Cr - 0,15NiTi + 2,04NiAlTi$ ,  
 $\bar{\varepsilon}^2 = 0,09$ .

2.  $\sigma^{1000} = 249,35 + 86,60Ir + 18,85Re - 27,7V - 2362,39B + 0,211Ta + 15,33Al - 5,106Ti + 8,04Mo - 5,35Co + 0,704Zr + 2,76NiAlTi$ ,  $\bar{\varepsilon}^2 = 0,08$ .

3.  $\sigma^{1000} = 282,37 + 105,71Ni - 0,49Ta - 22,55Nb + 18,99Al - 2,97W - 12,16Co - 12,45Cr - 0,9NiTi + 5,22NiTa + 0,002B$ ,  $\bar{\varepsilon}^2 = 0,06$ .

**Схема многорядного алгоритма МГУА:**

**1-й ряд** — на основе данных таблицы наблюдений строятся частные описания от всех попарных комбинаций исходных (переобозначенных) аргументов, приближающие по МНК выходную переменную  $q$ :

$$y_1 = f_1(x_1, x_2), y_2 = f_2(x_1, x_3), \dots, y_k = f_k(x_{n-1}, x_n),$$

из этих  $k = C_n^2$  моделей отбирается некоторое число  $F_1$  лучших по внешнему критерию;

**2-й ряд** — полученные переменные принимаются в качестве аргументов 2-го ряда, и снова строятся все частные модели от двух аргументов:

$$z_1 = \varphi_1(y_1, y_2), z_2 = \varphi_2(y_1, y_3), \dots, z_l = \varphi_l(y_{F_1-1}, y_{F_1}), l = C_{F_1}^2.$$

Из них по внешнему критерию отбираются  $F_2$  лучших моделей в качестве переменных следующего ряда и т. д. Ряды наращиваются до тех пор, пока снижается значение внешнего критерия. Каждое частное описание может быть линейной  $f = a_0 + a_1x_i + a_2x_k$  или нелинейной  $f = a_0 + a_1x_i + a_2x_k + a_3x_ix_k$ ,  $f = a_0 + a_1x_i + a_2x_k + a_3x_i^2 + a_4x_k^2 + a_5x_ix_k$  функцией от двух переменных, коэффициенты которой можно определить по МНК.

Таким образом, в многорядных алгоритмах МГУА воспроизводится схема массовой селекции.

Выбор наилучших моделей осуществлялся по критерию регулярности, характеризующему их прогностические возможности

$$\varepsilon^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{проб}}} (q_{i \text{ факт}} - q_{i \text{ модели}})^2}{\sum_{i=1}^{N_{\text{проб}}} q_{i \text{ факт}}^2}. \quad (7)$$

Модели, полученные при использовании многорядной схемы МГУА:

1.  $\sigma^{1000} = 19x_1 + 7,8x_1x_9 + 3,5x_3x_6 + 39x_3x_{10} + 14,9x_9 + 0,76x_3x_8 + 4,7x_8 + 5,7x_7 + 245,2$ ,  
при  $\varepsilon^2 = 0,16$ ;

2.  $\sigma^{1000} = 14x_1 + 3x_1x_9 + 0,5x_3x_5 + 16x_2x_3 - 1,3x_8 + 4x_3x_4 - 8,4x_9 + 6,72x_7 + 237,4$ ,  
при  $\varepsilon^2 = 0,19$ ;

где  $x_1 = \text{C}$ ;  $x_2 = \text{Cr}$ ;  $x_3 = \text{Ni}$ ;  $x_4 = \text{Co}$ ;  $x_5 = \text{Mo}$ ;  $x_6 = \text{W}$ ;  $x_7 = \text{Ti}$ ;  $x_8 = \text{Al}$ ;  $x_9 = \text{B}$ ;  $x_{10} = \text{Nb}$ .

Модели, построенные по алгоритмам МГУА, по своим прогнозирующим свойствам значительно превосходят регрессионные модели в силу того, что по этим алгоритмам автоматически (за счет применения критерия внешнего дополнения) отбираются аргументы, наиболее информативные для данного объекта моделирования. При проверке моделей на реальных сплавах, модели, полученные по МГУА, предсказывают свойство с ошибкой 6...10%.

**Третий подход** состоит в использовании многослойного персептрона, обученного по методу обратного распространения ошибки. Анализ результатов машинных

испытаний производился по ошибке прогнозирования по сравнению с экспериментальными данными. Многослойный перцептрон с количеством слоев 3 давал лучший прогноз, ошибка прогнозирования для данного исследования определялась в пределах 3...20%.

Переход от полученных моделей к составам производился с применением метода нелинейной оптимизации Левенберга-Маркара.

*Четвертая глава* посвящена разработке программного обеспечения для автоматизированного проектирования сплавов, исследованию свойств разработанного сплава УГАТУ-5 и его промышленной апробации.

На основе предлагаемого математического аппарата в Matlab 6.0 разработано программное обеспечение для автоматизированного проектирования для синтеза ЖС. Рассмотрена структура (рисунок 6) и функции автоматизированной системы проектирования жаропрочных никелевых сплавов.

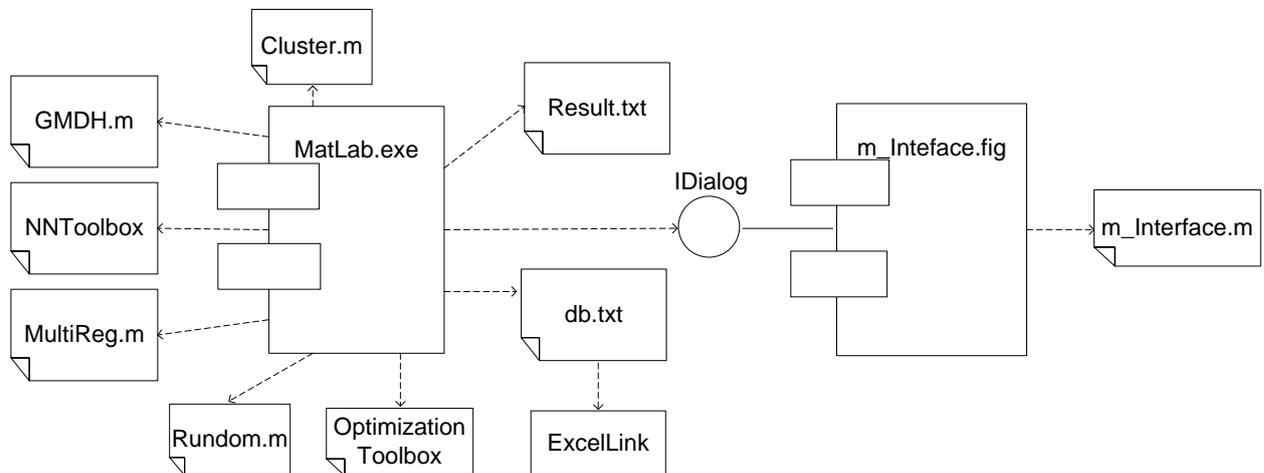


Рисунок 6. Структура САПР для синтеза ЖС

С помощью указанной методики разработаны новые составы сплавов, обладающие высоким уровнем жаропрочных свойств. Исследовались литейные свойства, кратковременная прочность и пластичность при нормальной и высоких температурах и длительная прочность и пластичность.

Оптимальное легирование сплава УГАТУ-5 обеспечивает сужение интервала кристаллизации ( $\Delta T_{кр} = 41$  °С против  $\Delta T_{кр} = 67$  °С для сплава ЖС32) из-за меньшего содержания **Mo** и **C**, увеличивающих  $\Delta T_{кр}$  за счёт снижения температуры солидус, и большего содержания **Re** и **Ta**, значительно повышающих температуру солидус. Кроме того, **Ta** блокирует струйную ликвацию, вызывающую искажение конфигурации дендритов и образование посторонних кристаллов при направленной кристаллизации и таким образом повышает технологичность.

Это подтверждается тем, что при одинаковых параметрах технологического процесса сплав УГАТУ-5 имеет более совершенное дендритное строение и более равномерное распределение дисперсных частиц  $\gamma'$ -фазы, чем серийный сплав ЖС32, а в его структуре отсутствуют заметные выделения частиц карбидных фаз, вызывающих отклонение от

регламентированной кристаллической макроструктуры при направленной кристаллизации (рисунок 7).

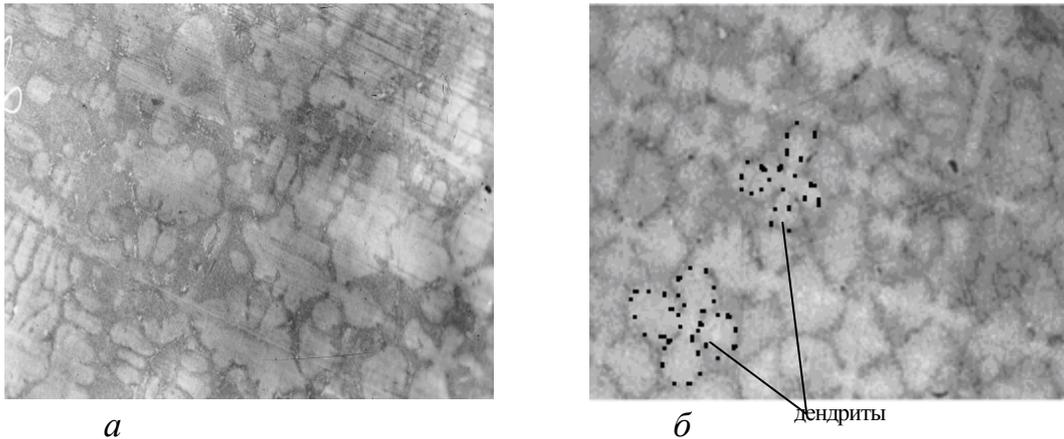


Рисунок 7. Макроструктура (x 50) сплавов ЖС32 (а) и УГАТУ-5 (б)

Меньшее содержание **С**, **Mo** и **W** препятствует образованию дисперсных частиц карбидов, увеличивающих вязкость расплава, а большие содержания **Re**, **Ta** и **Cr** увеличивают скрытую теплоту кристаллизации и теплоёмкость расплава. Это должно обеспечить лучшие литейные и физико-механические свойства сплава УГАТУ-5, по сравнению с серийным сплавом ЖС32. Повышение степени легирования сплава УГАТУ-4 Ta и Re (по данным С.З. Бокштейна и др.) способствует резкому снижению диффузионной подвижности ЛЭ при высоких температурах, что приводит к значительному упрочнению  $\gamma$ -твердого раствора и стабилизации  $\gamma'$ -фазы.

Данные исследований показали, что при всех температурах испытания и сроках службы, по сравнению с базовым сплавом ЖС32, имеющим жаропрочность  $\sigma_{100}^{1000} = 251$  МПа, синтезированный сплав УГАТУ-5 имеет наибольшую жаропрочность  $\sigma_{100}^{1000} = 344$  МПа. Это подтверждается исследованиями механических свойств сплавов путем испытаний на растяжение согласно ГОСТ 1497-84 и ГОСТ 9651-84 при температурах 20 °С и 1000 °С, и на длительную прочность и пластичность при температуре 1000 °С согласно ГОСТ 10145-81. В результате сравнения свойств сплавов ЖС32 и УГАТУ-5 можем заключить, что при температуре 20 °С свойства сплава УГАТУ-5 близки свойствам сплава ЖС32, а при высоких температурах испытания (1000 °С) разупрочнение сплава УГАТУ-5 происходит более медленно, и в результате его прочностные показатели превосходят серийный сплав по длительной прочности на 30...50% и на 30...40% – по пластичности.

Литейные свойства сплавов исследовали в вакууме по оболочковой форме объемом 175 см<sup>3</sup>, изготовленной по модели, полученной запрессовкой модельной массы в малую комплексную пробу. Установлено, что свободная линейная усадка и трещинопоражаемость сплава УГАТУ-5 меньше, чем у сплава ЖС32 (рисунок 8, 9). С ростом перегрева над ликвидусом происходит увеличение трещинопоражаемости

ЖС (рисунок 9), при этом у сплава УГАТУ-5 эта тенденция выражена больше, чем у сплава ЖС32. Условно-истинная жидкотекучесть сплава УГАТУ-5 примерно соответствует жидкотекучести сплава ЖС32.

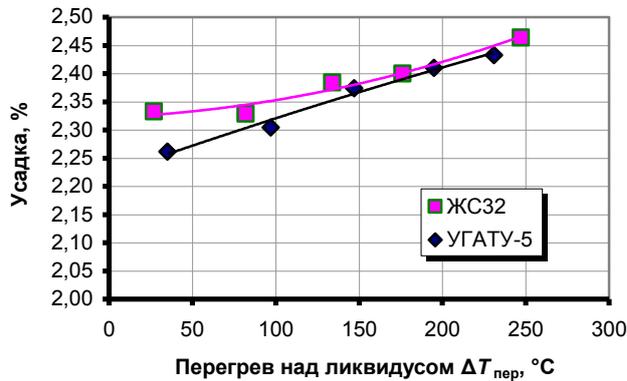


Рисунок 8. Зависимость линейной усадки сплавов от перегрева над температурой ликвидус

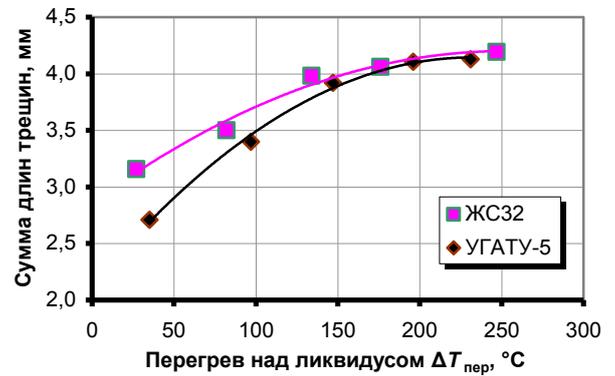


Рисунок 9. Зависимость трещинопоражаемости сплавов от перегрева над температурой ликвидус

С учётом того, что предлагаемый сплав обладает также высокой технологичностью, никелевый сплав УГАТУ-5 может быть рекомендован для литья турбинных лопаток ГТД с рабочей температурой до 1000...1050 °C методом высокоскоростной направленной кристаллизации.

*В приложениях* приведены рисунки и таблицы справочного характера, иллюстрирующие описываемые промежуточные результаты работы, а также акты внедрения.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана новая методика автоматизированного проектирования литейных никелевых ЖС с использованием априорной информации о составе и свойствах известных сплавов, которая позволяет сократить число опытных плавок и сэкономить расход дорогостоящих материалов.

2. Построены математические модели, описывающие влияние концентраций основных легирующих элементов на 100-часовую жаропрочность монокристаллических никелевых ЖС при 1000 °C и учитывающие наличие в сплаве упрочняющих фаз и влияние сложных соединений на жаропрочность.

3. Разработана тематическая БД на основе использования OLAP-технологии по литейным никелевым ЖС для отливок с направленной и монокристаллической структурой, включающая сведения о составах и свойствах более чем 200 сплавов.

4. Применен метод интерполяции в нелинейных шкалах для пополнения БД по никелевым ЖС с монокристаллической структурой, обеспечивающий наибольшую точность интерполяции значений жаропрочности на интервале известных рабочих температур. Интерполяция значений жаропрочностей сплавов позволила увеличить объем выборок при различных температурах на 16,3 %.

5. Разработаны модели для задачи синтеза сплавов, описания логического и физического уровня системы автоматизированного проектирования сплавов. Разработано алгоритмическое и программное обеспечение для автоматизированного проектирования литейных никелевых ЖС с направленной и монокристаллической структурой.

6. Разработан новый многокомпонентный высокожаропрочный литейный монокристалльный никелевый ЖС УГАТУ-5, обладающий высоким уровнем жаропрочных и литейных свойств по сравнению с серийным сплавом ЖС32.

## **ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАННЫЕ В РАБОТАХ**

### *В рецензируемом журнале из списка ВАК*

1. Математическое моделирование влияния легирующих элементов на жаропрочность никелевых сплавов с монокристаллической структурой / О.С. Нургаянова, А.А. Ганеев, С.П. Павлинич // Вестник УГАТУ : науч. журн. Уфимск. гос. авиац. техн. ун-та. 2006. Т. 8, №1 (17). С. 91–96.

### *В других изданиях*

2. Система планирования эксперимента для синтеза новых сплавов / Д.В. Попов, А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Компьютерные науки и информационные технологии (CSIT'2003) : Тр. 5-го Междунар. симп. Уфа : УГАТУ, 2003. Т. 2. С. 86–90. (Статья на англ. яз.).

3. OLAP-подход к представлению данных по жаропрочным сплавам / Д.В. Попов, А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Компьютерные науки и информационные технологии (CSIT'2003): Тр. 5-го Междунар. симп. Уфа : УГАТУ, 2003. Т. 2. С. 266–273. (Статья на англ. яз.).

4. Разработка новых жаропрочных материалов с применением генетического алгоритма для оптимизации матрицы планирования эксперимента / Д.В. Попов, А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Инновации в машиностроении. Пенза, 2003. С. 24–27.

5. Применение генетического алгоритма для синтеза жаропрочных никелевых сплавов / Д.В. Попов, А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Ползуновский альманах. 2003. № 3-4. С. 81–82.

6. MATLAB – приложение для проектирования новых сплавов / Д.В. Попов, О.С. Нургаянова, А.А. Ганеев // тр. II Всерос. науч. конф. Проектирование инженерных и научных приложений в среде MATLAB. : М. : ИПУ РАН, 2004. С. 300–304.

7. Минимизация затрат на разработку новых сплавов / Д.В. Попов, А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Принятие решений в условиях неопределенности. Вопросы моделирования : межвуз. науч. сб. Уфа : УГАТУ, 2004. Вып. 1. С. 85–91.

8. Моделирование зависимости состав-свойство жаропрочных никелевых сплавов многомерным корреляционным сплайном / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Ползуновский альманах. 2004. № 4. С. 135–137.

9. Нейросетевой подход к прогнозированию жаропрочности литейных никелевых сплавов / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Искусственный интеллект в XXI веке. Пенза, 2004. С. 95–98.

10. Подходы к автоматизации проектирования новых литейных жаропрочных никелевых сплавов / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Вестник алтайского государственного технического университета. 2005. № 3-4. С. 112–115.

11. Применение метода статистического моделирования для синтеза сплавов / Ю.Л. Пустовгаров, О.С. Нургаянова // Литейные процессы : межрег. науч. сб. Магнитогорск, 2005. Вып.5. С. 156–161.

12. Свид. об офиц. рег. программ для ЭВМ № 2005611227. Система оценки свойств жаропрочности монокристаллических никелевых сплавов (ValAP) / О.С. Нургаянова, А.А. Ганеев М. : Роспатент, 25.05.2005.

13. Свид. об офиц. рег. программ для ЭВМ № 2005611330 Система планирования эксперимента для синтеза новых сплавов (OptimalD) / Д.В. Попов, О.С. Нургаянова М. : Роспатент, 2.06.2005.

14. Сравнение прогнозирующих свойств моделей регрессионного типа и МГУА при проектировании никелевых сплавов / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Мавлютовские чтения : сб. тр. Уфа : УГАТУ, 2006. Т. 5. С. 22–28.

15. Система автоматизированного проектирования литейных никелевых жаропрочных сплавов с монокристаллической структурой / О.С. Нургаянова, А.А. Ганеев, С.П. Павлинич // Ползуновский альманах. 2006. № 3. С. 22–27.

Диссертант

*О.С. Нургаянова*