

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАЗРАБОТКА НОВЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ

ОАО "НПО "САТУРН":

Александр Вячеславович Логунов, главный специалист по материалам и технологиям, д.т.н., профессор

Юрий Николаевич Шмотин, генеральный конструктор, к.т.н.

Игорь Алексеевич Лещенко, ведущий инженер-конструктор, д.т.н., доцент

Роман Юрьевич Старков, главный конструктор, к.т.н.

Представлен новый метод, обеспечивающий получение моделей "состав - свойства" для сплава, имеющий высокую точность и предсказательную способность.

На базе предложенного метода разработана комплексная программа, позволяющая в автоматизированном режиме с использованием процедуры многокритериальной оптимизации осуществить расчетное определение составов перспективных сплавов, удовлетворяющих критериям, заданным разработчиком.

New method is presented, which ensures creation of models, connecting composition and properties of alloys, and having high accuracy and fine predictive capability.

On the basis of proposed method the software complex was developed, which uses multiobjective optimization procedure and provides automated computational search for compositions of perspective alloys, keeping the requirements defined by developer.

Ключевые слова: жаропрочность, суперсплав, математическая модель, поверхность отклика, оптимизация, технология.

Keywords: heat-resistance, superalloy, mathematical model, response surface, optimization, technology.

Часть 1. Технология моделирования

Характерной особенностью современного периода развития материалов и технологий является значительное усложнение как составов сплавов, так и процессов получения из них деталей с особыми свойствами (в т.ч. монокристаллических рабочих и сопловых охлаждаемых лопаток с совершенной структурой, в которой отсутствуют вредные фазовые образования, поры и рыхлоты, и на которые нанесены эффективные покрытия, надежно защищающие их от высокотемпературного коррозионного воздействия в течение всего срока эксплуатации деталей).

Острота проблемы заключается в том, что достигнутая сложность легирования (в первую очередь жаропрочных литейных никелевых сплавов) привела к тому, что дальнейшее их развитие и оптимизация составов перспективных композиций непрерывно связаны с обеспечением одновременного учета значительного количества факторов, прямым образом влияющих на их работоспособность, в частности:

- $V_{\gamma'}$ - фазы (объемная доля выделений γ' -фазы);
- $M(\bar{d}_{\gamma'})$ - параметр, характеризующий уровни концентрации валентных электронов γ' -фазы, определяющих возможность образования охрупчивающих топологических плотноупакованных (ТПУ) соединений;
- $\Delta a/a$ - относительная разность параметров кристаллических решеток γ - и γ' -фаз;
- σ_{τ}^r - длительная прочность сплава до разрушения в течение времени τ при температуре t ;
- d - удельный вес сплава и другие.

Естественно, что оптимальное решение задачи создания новых технологий сплавов на современном этапе возможно при активном развитии подходов на основе моделирования процессов, определяющих взаимосвязь уровня и характера легирования с термодинамическими, структурными, концентрационными, прочностными и другими параметрами исследуемых высокотемпературных металлических материалов.

Аналогичные проблемы возникают при разработке и оптимизации параметров новых технологических процессов.

Эффективная реализация многих современных технологий (в частности, нанесение полифункциональных, многослойных защитных покрытий, в которых каждый слой выполняет предопределенную ему функцию) возможна также при разработке сложных модельных подходов, учитывающих комплекс факторов, прямым образом определяющих качество полученной продукции.

Таким образом, развиваемые аналитические подходы, связанные с разработкой и реализацией моделей, могут быть эффек-

тивно использованы не только при изучении многопараметрических аэродинамических и тепловых процессов, но и при создании новых материалов и технологий.

В данной работе представлена новая технология моделирования и поиска состава жаропрочного сплава на никелевой основе. Его реализация привела к созданию новых особожаропрочных литейных никелевых сплавов для охлаждаемых лопаток газотурбинных установок, в том числе работающих в условиях активного воздействия морской солевой коррозии.

Предпосылки для разработки методологии программного автоматизированного расчета термодинамических, структурных и прочностных параметров жаропрочных никелевых сплавов

Созданные в настоящее время опытные композиции сплавов, в частности, экономнолегированные литейные монокристалльные никелевые жаропрочные сплавы СЛЖС-3 и СЛЖС-1, обеспечили получение наиболее высоких в своем классе характеристик жаропрочности.

Для эксплуатационных свойств литейных жаропрочных сплавов определяющую роль играет их состав. Сложность задачи поиска новых составов сплавов состоит в том, что необходимо найти оптимальные решения, одновременно удовлетворяющие нескольким, противоречащим друг другу требованиям, а именно:

- сплав должен иметь наиболее высокий уровень жаропрочности или входить в группу наиболее жаропрочных сплавов;
- сплав не должен содержать в своем составе чрезвычайно дорогой элемент платиновой группы рутений (хотя он оказывает существенное положительное влияние на жаропрочность и введен в состав всех последних наиболее жаропрочных отечественных и зарубежных сплавов);
- в составе сплава не должно быть рений, или он должен содержаться в ограниченном количестве (рений также улучшает жаропрочность, но одновременно резко увеличивает стоимость сплава, его плотность, а также ухудшает высокотемпературную стабильность материала).

Когда количество легирующих элементов достигает десятка, указанная проблема с математической точки зрения представляет собой сложную задачу многопараметрической оптимизации. Ее решение может быть получено лишь на основе использования методов автоматизированного поиска оптимальных соотношений, для работы с которыми необходимо создание специальных компьютерных математических моделей, связывающих состав сплава и его свойства.

Математическая модель (ММ) для расчета характеристик жаропрочных никелевых сплавов

ММ создается на основе построения аппроксимирующих зависимостей типа поверхностей отклика. В качестве аргументов этих зависимостей выступают процентные доли всех легирующих компонентов сплава.

Ключевым моментом при построении математической модели жаропрочного сплава является выбор структуры функции аппроксимации (ФА). В литературе (например, [1]) описаны модели, основанные на линейных регрессиях, в которых параметры свойств сплава определяются как

$$Par = K_0 + \sum_{i=1}^N K_i \cdot m_i, \quad (1)$$

где K_0, K_i - коэффициенты регрессии,
 m_i - массовые доли компонентов в сплаве,
 N - количество компонентов сплава.

Несомненными достоинствами линейной регрессии являются простота алгоритма получения коэффициентов, относительно малое количество точек, потребное для работы, а также возможность получения аналитического выражения функциональной зависимости. Однако, чем выше нелинейность в действительной зависимости между аппроксимирующим параметром и аргументами, тем хуже точность такого подхода.

В рамках настоящей работы при построении модели никелевого жаропрочного сплава было решено не ограничиваться линейной регрессией. Кроме нее рассматривались следующие алгоритмические реализации процедур построения поверхности отклика:

- Квадратическая регрессия без ковариаторных членов.

При таком подходе параметры свойств определяются следующим образом

$$Par = K_0 + \sum_{i=1}^N K_i \cdot m_i + \sum_{i=1}^N K_{(N+i)} \cdot m_i^2. \quad (2)$$

Указанный подход является логичным шагом к учету нелинейности связей между аппроксимируемым параметром и аргументами при невозможности получить полноквадратичную регрессию из-за недостаточного количества экспериментальных точек.

- Модифицированный метод наименьших квадратов (МНК) с расширенным составом переменных.

В основе подхода лежит полноквадратичная регрессия при расширенном составе переменных, участвующих в формировании регрессоров. В расширенный состав переменных входят не только сами переменные, но также и функциональные зависимости этих переменных. Число регрессоров может оказаться очень большим, поэтому данный алгоритм применяет адаптивную селекцию только тех регрессоров, которые наиболее информативны при представлении поверхности отклика.

При настройке параметров данного типа поверхности отклика учитывается максимальное число коэффициентов регрессии, а также относительная точность, при достижении которой процедура адаптивной селекции завершает работу. Чем больше максимальное число коэффициентов регрессии, тем более точно можно описать исходные точки.

- Взвешенная аппроксимация.

Для заданного набора из m точек $(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \bar{x}^3, \dots, \bar{x}^m)$ функция аппроксимации имеет вид

$$f(\bar{x}) = \frac{\sum_{i=1}^m (\bar{x}) \cdot f(\bar{x}^i)}{\sum_{i=1}^m W^i(\bar{x})}, \quad (3)$$

где \bar{x}^i - i -я точка плана эксперимента (вектор);

$f(\bar{x}^i)$ - значение функции в i -й точке;

$W^i(\bar{x})$ - весовая функция для i -й точки.

Весовая функция $W^i(\bar{x})$ представляет собой функцию, значение которой равно 1 при $\bar{x} = \bar{x}^i$, и уменьшается при увеличении

расстояния от точки \bar{x} до \bar{x}^i . Весовая функция определяется, как

$$W^i(\bar{x}) = C_1^{R^i(\bar{x})/C_2} \quad (4)$$

где $R^i(\bar{x})$ - нормализованное расстояние в N_x -мерном пространстве

$$R^i(x) = \frac{\sum_{j=1, N_x} (x_j - x_j^i)^2}{\max\left(\sum (x_j - x_j^i)^2\right)}; \quad (5)$$

C_1 - константа;

C_2 - параметр гибкости, определяющий форму весовой функции (рис. 1).

Чем меньше величина параметра гибкости C_2 , тем ближе к исходным точкам проходит функция аппроксимации, однако она при этом становится менее гладкой (рис. 2).

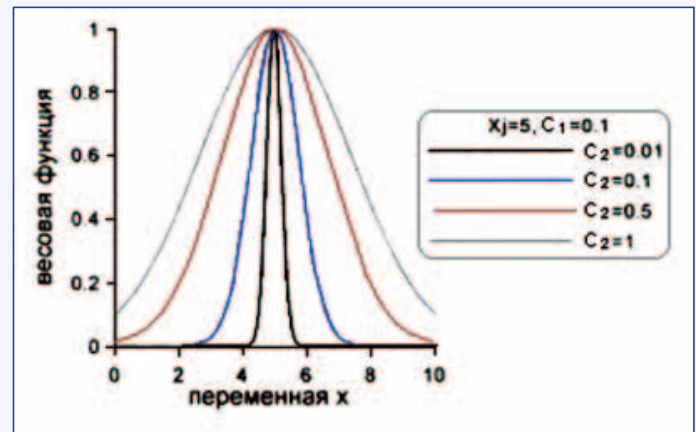


Рис. 1. Пример весовой функции

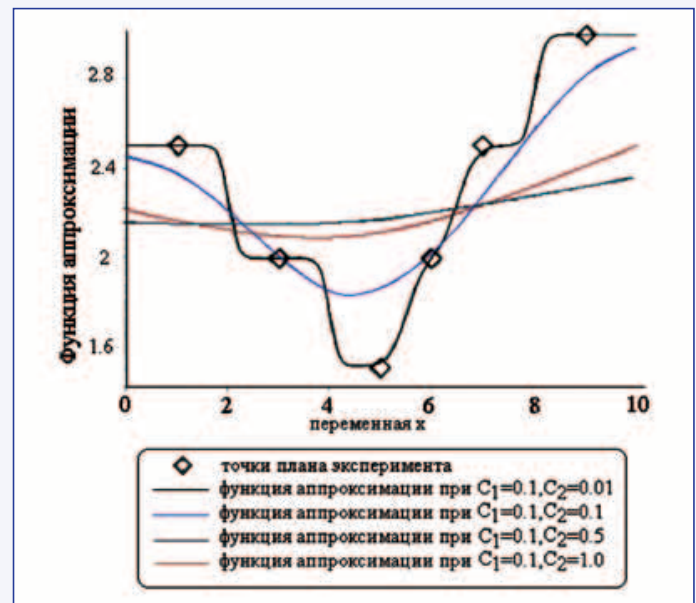


Рис. 1. Пример функции аппроксимации

- Регрессия с локальным взвешиванием.

В литературе [2] данный подход представлен как "Moving Least Squares". Основная идея подхода состоит в улучшении точности описания каждой точки пространства за счет адаптивного применения весовых коэффициентов к исходному множеству точек. Вес каждой точки определяется индивидуально в соответствии с весовой функцией $W(d)$, которая уменьшается при росте расстояния d между этой точкой и точкой, в которой определяется функция аппроксимации. В отличие от традиционной регрессии, метод наименьших квадратов применяется при каждом обращении к функции аппроксимации. Это в некоторой степени увеличивает вычислительные затраты на работу с данной процедурой.

Весовая функция может определяться, как

$$W(d) = \frac{1}{1 + a \cdot d^b}, \quad (6)$$

либо, как

$$W(d) = e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{d}{a}\right)^2}, \quad (7)$$

где d - нормализованное расстояние;

a и b - константы, определяющие форму зависимости.

Примеры влияния коэффициентов a и b на весовую функцию показаны на рис. 3.

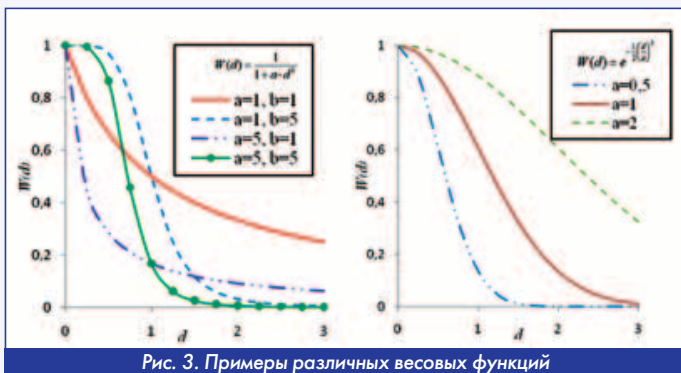


Рис. 3. Примеры различных весовых функций

Точность аппроксимации и предсказания

Очевидно, что для эффективного поиска нового сплава, удовлетворяющего множеству требований, необходимо использовать максимально точную математическую модель. При использовании моделей типа поверхности отклика оценку точности обычно проводят путем сравнения исходных значений аппроксимируемого параметра с теми значениями, которые выдает функция аппроксимации. Сравнивая величины среднеквадратического отклонения (СКО) либо максимальной ошибки Δ_{Max} для разных процедур аппроксимации, можно обоснованно выбрать самую точную функцию.

При использовании в качестве исходных данных экспериментальных результатов по существующим сплавам проявляется особенность, связанная с ограниченным количеством точек. В этом случае стремление повысить точность аппроксимации за счет подбора настроек функциональных зависимостей, как правило, оборачивается заметным ухудшением точности определения аппроксимируемого параметра в областях пространства, сколько-нибудь удаленных от обучающих точек.

Для оценки способности модели точно предсказывать значения функциональной зависимости там, где нет исходных точек, предполагается следующая процедура. Подход основан на разделении исходного множества на непересекающиеся обучающее и проверяющее подмножества. Следовательно, погрешность модели на точках проверяющего подмножества можно использовать как оценку ее предсказательной способности.

Поскольку количество экспериментальных точек весьма ограничено, рациональный выбор проверяющих точек из исходного множества представляет определенную сложность. С одной стороны, важно достаточно равномерно охватить проверяющими точками все пространство аргументов, а для этого их количество надо увеличивать. Если проверяющих точек слишком мало, то значительная часть пространства оказывается непроверенной. Но, с другой стороны, при увеличении количества проверяющих точек уменьшается количество точек в обучающем подмножестве, что заметно снижает его информативность.

Для решения этой проблемы в данной работе был применен следующий подход. Из исходного множества в проверяющее выбирается одна точка. Строится поверхность отклика и определяется погрешность аппроксимации на выбранной проверяющей точке. Указанная последовательность действий повторяется в цикле таким образом, чтобы перебрать в качестве проверяющей все точки ис-

ходного множества. Среднеквадратическое отклонение и максимальная ошибка, полученные с использованием всех точек исходного множества без участия этих точек в построении функции аппроксимации, и являются показателями, которые следует учитывать при сравнении различных подходов. Для обозначения этих величин далее будем использовать индекс "предсказательный".

Результаты исследования по выбору наилучшей функции аппроксимации

Исследования по выбору наилучшего вида аппроксимирующей зависимости проводились для каждого из 16 аппроксимируемых параметров. В качестве примера на рис. 4 показаны результаты оценки среднеквадратического отклонения для $V_{\gamma'}$ при различных типах и параметрах аппроксимации.



Рис. 4. Сравнение среднеквадратического отклонения для различных видов поверхности отклика

Рассмотрим взаимное изменение СКО аппроксимации и СКО предсказания. Из анализа данных, показанных на рис. 4 можно сделать вывод о том, что настройка функции аппроксимации на лучшее описание исходного множества точек почти всегда оборачивается ухудшением предсказательных свойств. Так, линейная регрессия обеспечивает наименьшее отличие между СКО аппроксимации и предсказания. Усложнение структуры функции аппроксимации путем добавления в состав регрессоров квадратичных членов незначительно повышает точность описания исходных точек, но заметно ухудшает предсказательные свойства функции аппроксимации. Аналогичное влияние оказывает увеличение числа регрессоров в модифицированном МНК, уменьшение параметра гибкости C_2 для взвешенной аппроксимации, а также уменьшение коэффициента a в регрессии с локальным взвешиванием.

Выбор наилучшей функции аппроксимации осуществляется на основании сравнительного анализа всех параметров, показанных на рис. 4. Так, для $V_{\gamma'}$ в качестве наилучшей функции выбрана регрессия с локальным взвешиванием (MLS) с коэффициентом a , равным 0,5. Данный вид аппроксимации обеспечивает наименьший уровень погрешности предсказания, и при этом находится в числе лучших вариантов по СКО и максимальной ошибке, определяемых для исходного множества точек.

Результаты работы по обеспечению наилучшей точности математической модели для всего комплекса показателей жаропрочных сплавов сведены в таблицу 1. Следует отметить, что для некоторых коэффициентов распределения легирующих элементов K_i количество точек исходных данных весьма мало. Это обстоятельство затрудняет получение хорошей аппроксимационной модели.

На рис. 5 представлены рассчитанные с помощью аппроксимирующих функций результаты изменения $V_{\gamma'}$ фазы в зависимости от содержания того или иного легирующего элемента, а в таблице 2 приведены результаты оценки точности расчета по представленной модели основных параметров литейных и дисковых жаропрочных сплавов никелевых сплавов. Точность оценивалась в сравнении с экспериментальными результатами, представленными в [3 - 6 и др.]. Видно, что метод обеспечивает весьма высокую точность описания связей "состав - свойства", что имеет важное значение для правильного прогноза оптимальных составов перспективных сплавов.

Таблица 1

Сводная характеристика ММ сплава						
Параметр	N арг.	N точек	Отн. СКО апп., %	Отн. Δ_{Max} апп., %	Отн. СКО предск., %	Отн. Δ_{Max} предск., %
$V_{\gamma'}$	11	87	3,1	9,4	6,9	24,7
σ_{1000}^{1000}	11	38	3,8	8,6	6,1	14,1
$T_{п.р.\gamma'}$	11	71	4,4	11,4	8,7	32,7
σ_{β} и σ_{02}	11	27	4,5	12,3	9,8	28,5
σ_{1000}^{1000}	11	51	4,4	10,4	7,7	32,7
K_{iCr}	11	31	8,3	22,9	21,9	50,3
K_{iCo}	11	27	9,8	20,7	17,3	45,8
K_{iW}	11	25	5,3	11,3	20,0	57,8
K_{iMo}	11	27	15,4	28,5	23,5	38,5
K_{iAl}	11	27	3,7	11,3	20,9	81,8
K_{iTi}	11	27	3,3	7,1	9,6	40,1
K_{iTa}	10	13	5,6	10,4	15,4	38,5
K_{iRe}	10	7	11,3	21,6	66,8	90,9
K_{iNb}	11	9	7,2	12,5	42,3	82,5
K_{iHf}	9	2	-	-	-	-
K_{iV}	9	3	-	-	-	-

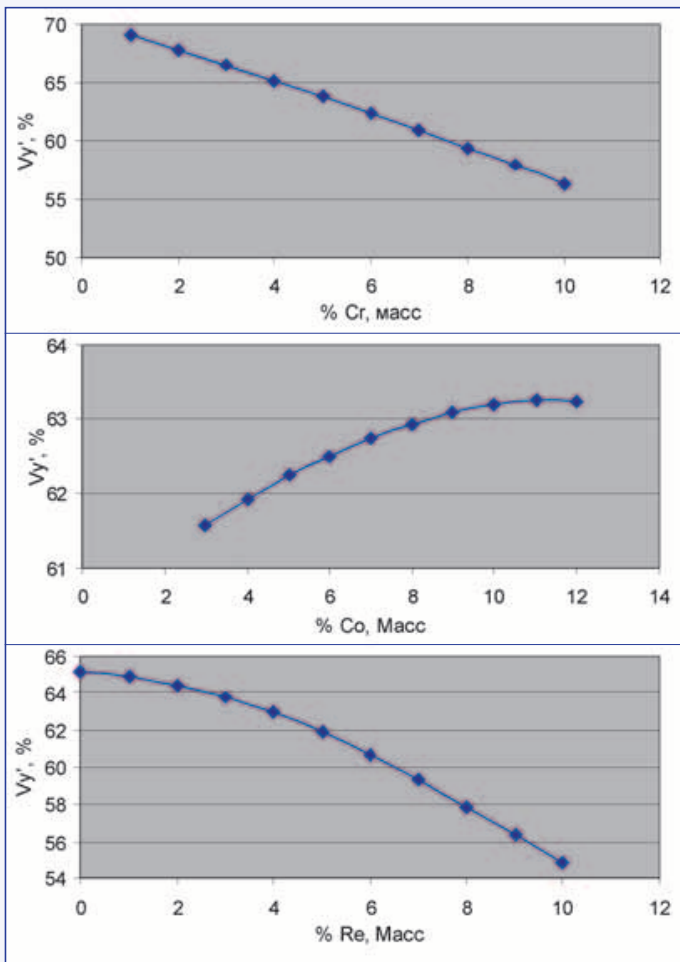


Рис. 5. Влияние изменения содержания легирующих элементов в сплаве на основе ЖС32М на величину $V_{\gamma'}$ -фазы

Приведенные в таблице 2 результаты сравнения экспериментальных данных и расчетных моделей указывают на достаточно высокую эффективность разработанного подхода. Полученные решения, устанавливающие связи "параметр-легирующее" отличаются наиболее высокой среди известных на сегодняшний день достоверностью и точностью. Представленные модели легли в основу созданного метода поиска оптимальных составов сплавов по заданным значениям структурных, термодинамических, прочностных, физических и других параметров жаропрочных сплавов.

Суть разработанной компьютерной программы, реализующей предложенный метод, заключается в том, что разработчик

Таблица 2

Результаты сравнения экспериментальных значений и данных, полученных с помощью аппроксимационных зависимостей			
Параметр	Размерность	$\Delta r_{ср}$	Количество сплавов
$T_{п.р.\gamma'}$ -фазы	°С	6,4	71
$V_{\gamma'}$ -фазы	Масс. %	1,4	87
σ_{1000}^{1000} литейных сплавов	МПа	7,1	47
σ_{1000}^{1000} литейных сплавов	МПа	7,3	38
σ_{β}^{20} дисковых сплавов	МПа	17,1	27
σ_{100}^{650} дисковых сплавов	МПа	30	38

сплава задает желаемые значения (или ограничения) для основных параметров, определяющих работоспособность сплавов. Программа модели сплава обеспечивает автоматизированный расчет всех заложенных в нее параметров (рис. 6). Она, в свою очередь, является одной из составных частей технологии поиска оптимизированных составов.

Вторая компонента программного комплекса обеспечивает интерфейс для стыковки математической модели сплава с комплексом многокритериальной оптимизации IOSO NM. Это позволяет в автоматизированном режиме осуществить поиск оптимальных составов сплавов, удовлетворяющих критериям, введенным в программу разработчиком сплавов (рис. 7).

Таким образом, созданная программная реализация математической модели позволяет не только рассчитывать в автоматизированном режиме важнейшие характеристики, определяющие работоспособность никелевых жаропрочных сплавов, но и (что определяет ее принципиальную новизну) по заданным параметрам осуществлять автоматизированную разработку новых сплавов.

Литература

1. Е.Н. Каблов, Н.В. Петрушин "Компьютерный метод конструирования литейных жаропрочных никелевых сплавов", в сб. "Литейные жаропрочные сплавы. Эффект С.Т. Кишкина", М., "Наука", 2006. - 56 - 78 с.
2. Robust Design Optimization Based on Metamodeling Techniques, Florian Jurecka, Thesis of Doctoral Dissertation, Engineering, Technical University of Munchen, 2008.
3. Roger C. Reed The Superalloys. Fundamentals and Applications. Cambridge University Press. 2006. - 372 с.
4. В.В. Ртищев "Расчетные методы прогнозирования фазового состава, структурных характеристик и процессов длительной прочности по химическому составу жаропрочных сплавов на никелевой основе", в ст. "Жаропрочные и жаростойкие стали и сплавы на никелевой основе", под ред. О.А. Банных, М., "Наука", 1984. - 144 с.
5. Литейные жаропрочные сплавы "Эффект С.Т. Кишкина" М.: Наука, 2006 г., 100-113 с.
6. С.Т. Кишкин, Г.Б. Строганов, А.В. Логунов "Литейные жаропрочные сплавы на никелевой основе" М.: Машиностроение, 1987. - 111 с.

Связь с автором: 8-495-683-99-31