

КОМПЛЕКСНАЯ РАСЧЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ МЕТОДИКА ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

Разработана комплексная расчетно-аналитическая методика, включающая в алгоритм как традиционные методики, так и полученные математические регрессионные модели для прогнозирующих расчетов важнейших параметров, определяющих работоспособность литейных жаропрочных никелевых сплавов. Методика позволяет без проведения промежуточных экспериментов путем многокритериальной оптимизации состава проектировать как новые композиции, так и модернизировать составы известных промышленных сплавов с требуемым уровнем служебных характеристик.

Ключевые слова: жаропрочные никелевые сплавы (ЖНС), система легирования, критерии (параметры) работоспособности, многокритериальная оптимизация, регрессионное уравнение (РУ), регрессионная модель (РМ), комплексная расчетно-аналитическая методика (КРАМ).

Введение

В настоящее время в исследовательских центрах ведущих стран мира активно проводятся работы по разработке и внедрению в промышленность новых жаропрочных материалов. К наиболее перспективным материалам для высокотемпературного применения в газотурбостроении относится класс литейных жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС). До сих пор разработка жаропрочных сплавов данного класса осуществлялась эмпирическим путем. Определение эмпирическим путем оптимального химического состава, обеспечивающего требуемый комплекс служебных свойств – задача наукоемкая, требующая больших временных и финансовых затрат, а также промышленных и человеческих ресурсов. Поэтому, такой подход как «метод проб и ошибок» применительно к сложнoleгированным композициям никелевых сплавов типа ЖС практически себя исчерпал [1–3].

Применение для этих целей методов математического планирования эксперимента позволило существенно сократить количество непосредственно изучаемых композиций разрабатываемого сплава. Но в этом случае общее число опытных плавок, которое необходимо провести и изучить для выявления оптимального состава сплава достаточно велико. Вместе с тем, для широкого номенклатурного ряда литейных ЖНС традиционные методы не достаточно полно и универсально отражают влияние химического состава на те или иные свойства, что требует новых концептуальных подходов при разработке материалов данного класса. В последнее время получили широкое развитие методы компьютерного проектирования сплавов [1–9], в основу которых положены известные регрессионные уравнения (РУ) типа «состав-свойство». Однако следует отметить, что остается до конца невыясненным вопрос в

подходе к многокритериальной оптимизации состава сложнoleгированных композиций литейных ЖНС, обеспечивающей требуемый уровень служебных характеристик. В свою очередь, это требует как дальнейшего развития научных принципов легирования ЖНС, так и совершенствования методов их проектирования с использованием современных компьютерных технологий [1–8, 10–19].

В связи с этим, в последнее время формальные методы компьютерного проектирования получают все более широкое распространение и становятся необходимым инструментом для материаловедов при разработке современных жаропрочных материалов. По существу, традиционный метод «проб и ошибок» заменяется экономичным экспрессным методом «делай правильно с первого раза», что позволяет не только находить новые перспективные композиции, но и модернизировать химические составы известных промышленных серийных марок [1–4, 6–9].

Постановка задачи

Цель настоящей работы – разработать экспрессную комплексную расчетно-аналитическую методику (КРАМ) для проектирования литейных ЖНС, включающую в алгоритм как традиционные методики, так и полученные математические регрессионные модели, позволяющие с высокой степенью достоверности проводить прогнозирующие расчеты по группам важнейших параметров, определяющих работоспособность материалов данного класса.

С целью получения прогнозирующих универсальных математических регрессионных моделей (РМ) для расчета параметров работоспособности, была сформирована и обработана база экспериментальных данных широкого номенклатурного ряда литейных ЖНС.

Это результаты исследований более 100 композиций серийных отечественных и зарубежных литейных ЖНС с различными схемами легирования, с их экспериментальными значениями структурно-фазовых, физических, температурных, прочностных и коррозионных характеристик [1–3, 9–12], а также значениями параметров (критериев) структурной стабильности, полученных традиционными методиками Phasomp [5, 9], New Phasomp [13], ΔE - метод [14, 15].

После математической обработки большого массива экспериментальной базы данных была сделана выборка из 32-х наиболее известных промышленных отечественных и зарубежных литейных ЖНС, представляющих 5 поколений сплавов (TMS-71, ЗМИ-3У, CMSX-10, ЖС-32, ЖС-6К, ЖС-6У, ЖС-26, ЧС-70, ВЖМ1, ВЖМ4, ЖС3ЛС, ЖС-32Э, ВЖЛ12Э, CMSX-4, IN-939, GTD-111, IN-738LC, U-500, U-700, Rene N5, Rene N6, CM186LC, CM247LC, Rene 80, PWA1422, PWA1480, ЖСКС-1, ЖСКС-2, CMSX-11В, CMSX-11С, TMS-162, TMS-196). Выборка сплавов осуществлялась с позиций предоставления химических составов с различными системами легирования, охватывающих широкий диапазон по содержанию основных элементов: C=0–0,18 масс.%; Cr=2,0–22,5 масс.%; Co=3,0–19,0 масс.%; Al=1,9–6,2 масс.%; Ti=0–5 масс.%; Mo=0–6,4 масс.%; W=0–12,0 масс.%; Nb=0–1,6 масс.%; Ta=0–12,0 масс.%; Hf=0–1,5 масс.%; V=0–1,0 масс.%; Re=0–9,0 масс.%; Ru=0–6,0 масс.%, а также экспериментальных данных по группам параметров исследуемых ЖНС [1–3, 9–11].

Анализ результатов

В работах [16–22] сформулированы основные концептуальные подходы и принципы к разработке алгоритма методики КРАМ при проектировании литейных ЖНС с требуемым уровнем служебных свойств путем многокритериальной оптимизации состава. На основе обработки обширной экспериментальной базы данных литейных ЖНС, представляющих пять поколений сплавов с различными системами легирования, обоснованы основные критерии (параметры), обеспечивающие их работоспособность. Основные параметры работоспособности литейных ЖНС разделены на 6 основных групп: 1 – параметры структурной стабильности; 2 – структурно-фазовые; 3 – физические; 4 – температурные; 5 – коррозионные; 6 – прочностные.

Анализ экспериментальных данных, полученных отечественной и зарубежной практикой на широком спектре промышленных литейных ЖНС, позволил установить зависимость целого ряда групп важнейших параметров, которые хорошо коррелируют с «мини» легирующими комплексами внутри общего химического состава литейных ЖНС. Например, суммарное содержание γ -твердорастворных упрочнителей (Σ_{γ}) и γ' -образующих ($\Sigma_{\gamma'}$) элементов [20], объемное количество ($V_{\gamma'}$) γ' -фазы [21], параметр коррозии ($P_{КС}$) и параметры структурной стабильности \bar{N}_{γ} , $\bar{M}d_{\gamma}$, $\bar{M}d_C$, ΔE [22].

На рисунке 1 представлен общий алгоритм разработанной методики КРАМ для проектирования литей-



Рис. 1. Общий алгоритм компьютерного расчета разработанной методики КРАМ для проектирования литейных ЖНС с требуемым уровнем служебных характеристик

ных ЖНС с требуемым уровнем служебных свойств, включающий наряду с известными методиками полученные группы математических РМ для прогнозирующих расчетов важнейших параметров, определяющих работоспособность литейных ЖНС (табл. 1).

В результате математической обработки большого массива экспериментальных данных по классу литейных ЖНС с разными системами многокомпонентного легирования был получен ряд универсальных расчетных прогнозирующих математических РМ для каждой группы параметров, которые представляют собой зависимости типа «состав–свойство» или «параметр–свойство».

Математическая обработка расчетных данных по параметрам группы 1 (структурная стабильность) проводилась известными методами [5, 9, 10, 13–15], по параметрам групп 2 и 3 (структурно-фазовые и физические) проводилась CALPHAD-методом [16, 17]. Математическая обработка экспериментальных данных по параметрам групп 4, 5 и 6 (температурным, коррозионным и прочностным) проводилась в программном комплексе EXCEL с помощью прикладного пакета «Регрессионный анализ». Это позволило построить графики функций (линии трендов) и получить математические уравнения регрессионных моделей, которые для каждой конкретной группы оптимально описывают зависимость параметров от величины определенного «мини» легирующего комплекса. Полученные универсальные математические РМ позволяют с высокой степенью достоверности проводить прогнозирующие расчеты для соответствующих групп параметров при проектировании как новых сплавов, так и модернизации составов серийных промышленных марок.

На основании результатов математической обработки данных по химическому составу γ - твердых растворов исследованных литейных ЖНС традиционными методами PHACOMP [5, 9], New PHACOMP [13], были получены регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности $\bar{N}_{v\gamma}$, $\bar{M}d_{\gamma}$ [20]. После обработки данных по параметру дисбаланса системы легирования исследованных литейных ЖНС известным ΔE - методом [14, 15], была получена регрессионная модель для расчета параметра структурной стабильно-

сти $\bar{M}d_C$ по величине параметра ΔE - сбалансированности системы легирования [22]. На рисунке 2 и в таблице 2 представлены полученные математические РМ для расчета параметров (группа 1) структурной стабильности $\bar{N}_{v\gamma}$, $\bar{M}d_{\gamma}$ по величине соотношения Cr/Cr+Mo+W = $\Pi_{\text{тты}}$, а параметра $\bar{M}d_C$ по величине дисбаланса системы легирования ΔE , апробированные на исследованных литейных ЖНС. Расчеты проводились в ат. %.

В таблице 3 представлены результаты расчетов параметров структурной стабильности (группа 1) для промышленного сплава ЗМИ-3У, полученные по регрессионным моделям, приведенным в таблице 1, в сравнении с данными традиционных методов Phacomr, New Phacomr и ΔE -метода [23].

Из рисунка 2 видно, что зависимость параметров структурной стабильности (группа 1) $\bar{N}_{v\gamma}$, $\bar{M}d_{\gamma}$ от величины соотношения элементов в сплаве $[\text{Cr} / \text{Cr} + \text{Mo} + \text{W}] = \Pi_{\text{тты}} (\% \text{ ат.})$, а также зависимость параметра $\bar{M}d_C$ от величины дисбаланса системы легирования ΔE в исследованных ЖНС наиболее оптимально описывается линейной функцией, имеющей общий вид: $y = ax + b$.

Расчеты структурно-фазовых (группа 2) и физических (группа 3) параметров проводились с помощью метода CALPHAD [16, 21]. Данный тип термодинамических расчетов позволил установить связь между химическим составом сплава и его фазовым составом, а также физическими параметрами (плотность, модуль упругости, теплопроводность, электрическое сопротивление, мисфит и др.).

В таблицах 4–6 для промышленного сплава ЗМИ-3У, взятого в качестве примера, представлены значения термодинамических расчетов структурно-фазовых (группа 2) и физических (группа 3) параметров, полученных CALPHAD-методом с помощью компьютерного моделирования процессов нагрева и охлаждения (кристаллизации), в сравнении с экспериментальными данными [23]. Термодинамические расчеты проводились для сплава ЗМИ-3У среднего уровня легирования, в результате чего был спрогнозирован его наиболее вероятный фазовый состав, количество фаз и их химический состав.

Таблица 1 – Основные параметры для многокритериальной оптимизации состава при проектировании литейных ЖНС

Контролируемые параметры	Ед. измер.
Суммарное кол-во электронных вакансий в γ - тв. растворе, $N_{v\gamma}$	–
Суммарное кол-во валентных электронов в γ - тв. растворе, Md_{γ}	–
Параметр дисбаланса системы легирования, $\Delta E = \pm 0,04$	–
Суммарное количество валентных электронов в сплаве, Md_C	–
Удельная плотность сплава, ρ	г / см ³
Мисфит $\delta = 2 \cdot (a_{\gamma} - a_{\gamma'}) / (a_{\gamma} + a_{\gamma'})$	%
Температура солидус, t_S	°С
Температура полного растворения γ' - фазы, $t_{П.Р.}^{\gamma'}$	°С
Температура локального плавления эвтектики, $t_{ЭВТ.}$	°С
Средняя скорость коррозии, V_a^t	г / м ² с
Количество упрочняющей γ' - фазы, $V_{\gamma'}^t$	%, масс.
Предел кратковременной прочности, σ_B^t	МПа
Предел длительной прочности, σ_{τ}^t	МПа

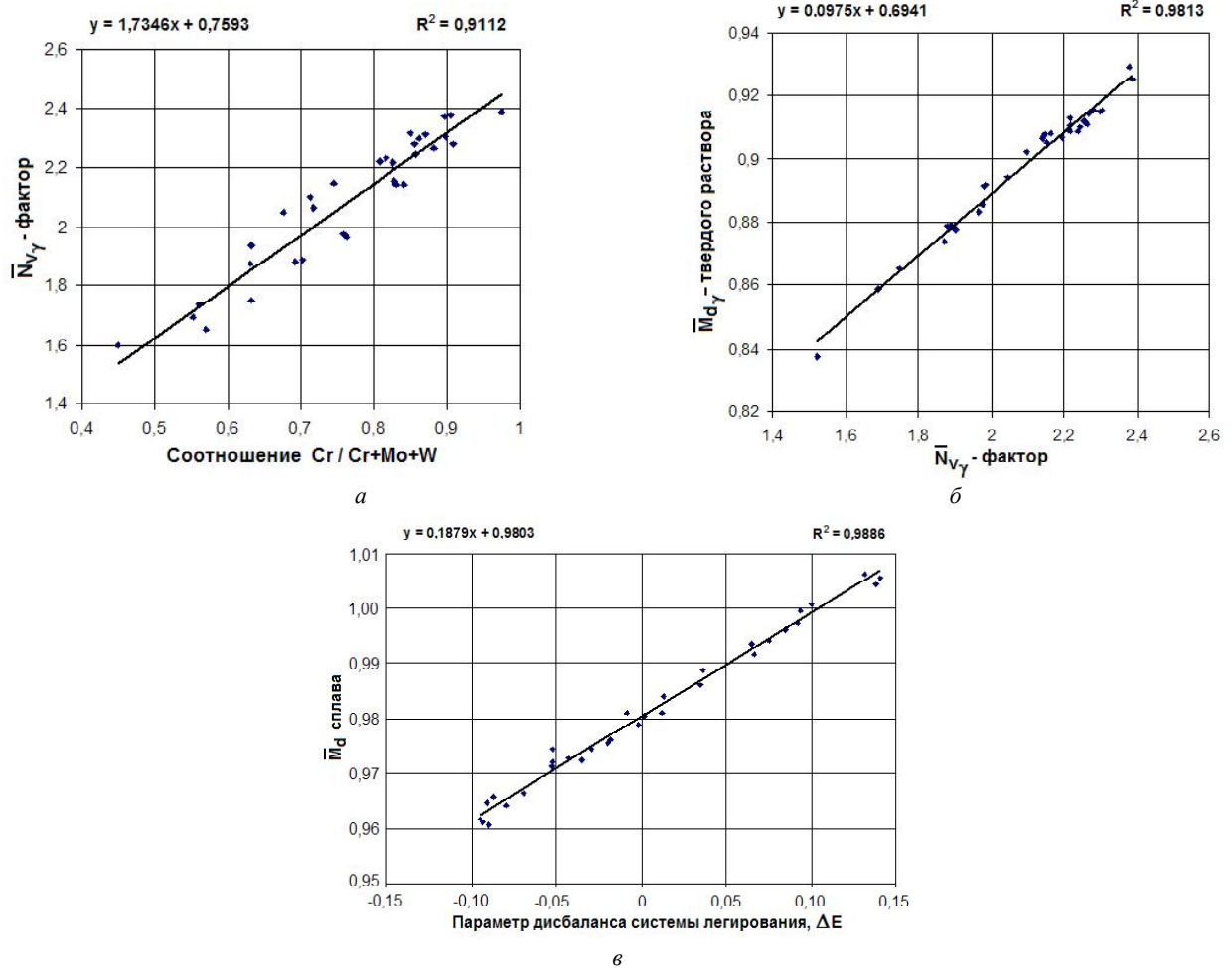


Рис. 2. Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности литейных ЖНС

Таблица 2 – Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности (группа 1) литейных ЖНС

Расчетный параметр	Условия стабильности	Коэффициент детерминированности, R ²	Вид регрессионной модели (группа 1)
$P_{ТНУ}$	–	–	$P_{ТНУ} = [Cr : (Cr + Mo + W)]$, % ат.
Nv_{γ}	$\leq 2,45$	0,9112	$Nv_{\gamma} = 1,7346 (P_{ТНУ}) + 0,7593$
Md_{γ}	$\leq 0,93$	0,9813	$Md_{\gamma} = 0,0975 (Nv_{\gamma}) + 0,6941$
ΔE [14, 15]	$0,00 \pm 0,04$	–	$\Delta E = \sum E_i \cdot C_i - 0,036 \sum A_i \cdot C_i - 6,28$
Md_C	$0,980 \pm 0,008$	0,9886	$Md_C = 0,1879 (\Delta E) + 0,9803$

Таблица 3 – Сравнительные значения параметров структурной стабильности (группа 1) для сплава ЗМИ-3У [23]

Сплав ЗМИ-3У	Параметры структурной стабильности				
	$P_{ТНУ}$	Nv_{γ}	Md_{γ}	ΔE	Md_C
Расчет по РМ	0,8421	2,2200	0,9106	+0,0362	0,9871
Phascomp	–	2,1431	–	–	–
New Phascomp	–	–	0,9065	–	0,9833
ΔE -метод	–	–	–	+0,0362	–

Таблица 4 – Химический состав сплава ЗМИ-3У среднего уровня легирования

Сплав ЗМИ-3У [23]	Содержание основных легирующих элементов, % масс.									
	C	Co	Cr	Al	Ti	Mo	W	B	Y	Ni
	0,11	5,0	13,3	3,4	4,8	0,8	7,3	0,015	0,03	Осн.

Таблица 5 – Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений структурно-фазовых параметров (группа 2) для сплава ЗМИ-3У [23]

Тип фаз	К-во фаз, % масс.		Расчетный химический состав фаз при 20 °С, %, масс.									
	Расч.	Эксп.	C	Co	Cr	Al	Ti	Mo	W	B	Y	Ni
γ -	46,07	–	–	9,17	26,05	0,35	0,06	0,52	7,63	–	–	56,22
γ' -	50,90	44-52	–	2,39	2,09	5,62	8,21	0,03	5,65	–	–	76,01
MC	0,80	0,9	15,13	–	0,73	–	57,69	0,16	26,29	–	–	–
M ₂₃ C ₆	2,05	1,9	5,10	1,01	71,54	–	–	13,45	5,13	–	–	3,77
M ₃ B ₂	0,18	0,2	–	–	21,84	–	–	63,88	6,02	8,08	–	0,18

Таблица 6 – Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений физических параметров (группа 3) для сплава ЗМИ-3У [23]

Сплав ЗМИ-3У	Значения физических параметров при 20 °С									
	ρ	E	$\alpha \cdot 10^6$	C_p	$r \cdot 10^6$	λ	$a_{\gamma'}$	a_{γ}	δ	
Ед. измерения	г/см ³	ГПа	1/К	Дж/г·К	Ом·м	Вт/м·К	А°	А°	%	
Расчет	8,29	212,5	12,23	0,430	0,151	10,42	3,5850	3,5780	-0,20	
Эксперимент	8,28	224,0	12,20	0,436	0,148	8,6	3,5874	3,5770	-0,29	

где ρ – удельная плотность; E – модуль упругости Юнга; α – коэффициент термического расширения; C_p – удельная теплоемкость; r – удельное электросопротивление; λ – теплопроводность; $a_{\gamma'}$ – параметр кристаллической решетки γ' - фазы; a_{γ} – параметр кристаллической решетки γ - твердого раствора; δ – (мисфит) размерное несоответствие параметров решеток.

В таблице 7 и на рисунке 3 представлены математические регрессионные модели для расчета температурных параметров (группа 4), полученных на основе математической обработки экспериментальных данных исследованных ЖНС методом дифференциального термического анализа (ДТА) [1–3, 17–24].

В таблице 8 представлены данные расчетных значений температурных параметров (группа 4) по приведенным на рисунке 3 и в таблице 7 математическим регрессионным моделям, в сравнении с эксперимен-

тальными данными для сплава ЗМИ-3У [23].

Из рисунка 3 видно, что зависимость температур ликвидус t_L и солидус t_S от суммы γ - твердорастворных упрочнителей ΣC_i^{γ} , а также температур начала оплавления эвтектики γ/γ' - $t_{\text{эвт}}$, начала $t_{\text{Н.Р.}}^{\gamma'}$ и полного растворения $t_{\text{П.Р.}}^{\gamma}$ основной упрочняющей γ' - фазы от суммы γ' - образующих элементов $\Sigma C_i^{\gamma'}$ (группа 4) хорошо коррелируют и оптимально описываются линейной функцией, имеющей общий вид: $y = ax + b$.

В таблице 9 и на рисунке 4 представлены математические РМ для расчета средней скорости коррозии V_q^t и критической температуры $t_{\text{КРИТ.}}$ (группа 5) по величине параметра коррозии $P_{\text{КС}}$. Математические РМ получены в результате математической обработки базы экспериментальных данных и апробированы на исследованных ЖНС.

Таблица 7 – Математические регрессионные модели для расчета температурных параметров (группа 4) литейных ЖНС

Расчетный параметр	Единица измерения	Коэффициент детерминированности, R^2	Вид регрессионной модели (группа 4)
ΣC_i^{γ}	%, масс.	–	$\Sigma C_i^{\gamma} = \text{Mo} + \text{W} + \text{Ta} + \text{Re} + \text{Ru}$
t_L	°С	0,9801	$t_L = 5,5572 \cdot (\Sigma C_i^{\gamma}) + 1309,3$
t_S	°С	0,9816	$t_S = 8,7819 \cdot (\Sigma C_i^{\gamma}) + 1189,6$
$\Sigma C_i^{\gamma'}$	%, масс.	–	$\Sigma C_i^{\gamma'} = \text{Al} + \text{Ti} + \text{Nb} + \text{Ta} + \text{Hf}$
$t_{\text{эвт}}$	°С	0,9563	$t_{\text{эвт}} = 16,059 \cdot (\Sigma C_i^{\gamma'}) + 1101,8$
$t_{\text{П.Р.}}^{\gamma'}$	°С	0,9715	$t_{\text{П.Р.}}^{\gamma'} = 25,073 \cdot (\Sigma C_i^{\gamma'}) + 955,01$
$t_{\text{Н.Р.}}^{\gamma'}$	°С	0,9691	$t_{\text{Н.Р.}}^{\gamma'} = 3,0087 \cdot (\Sigma C_i^{\gamma'}) + 818,49$

Таблица 8 – Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений температурных параметров (4-я группа) для сплава ЗМИ-3У [23]

Сплав ЗМИ-3У	Значения температурных параметров, °С								
	ΣC_i^{γ}	t_L	t_S	$\Delta t_{\text{КР.}} = t_L - t_S$	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$t_{\text{эвт}}$	$t_{\text{П.Р.}}^{\gamma'}$	$t_{\text{Н.Р.}}^{\gamma'}$	$\Delta t_{\text{ТО}} = t_{\text{эвт}} - t_{\text{П.Р.}}^{\gamma'}$
Расчет по РМ	8,1	1354,3	1260,7	93,6	8,2	1233,5	1160,6	843,2	72,9
Эксперимент	8,1	1350	1255	95,0	8,2	1235	1167	–	68,0

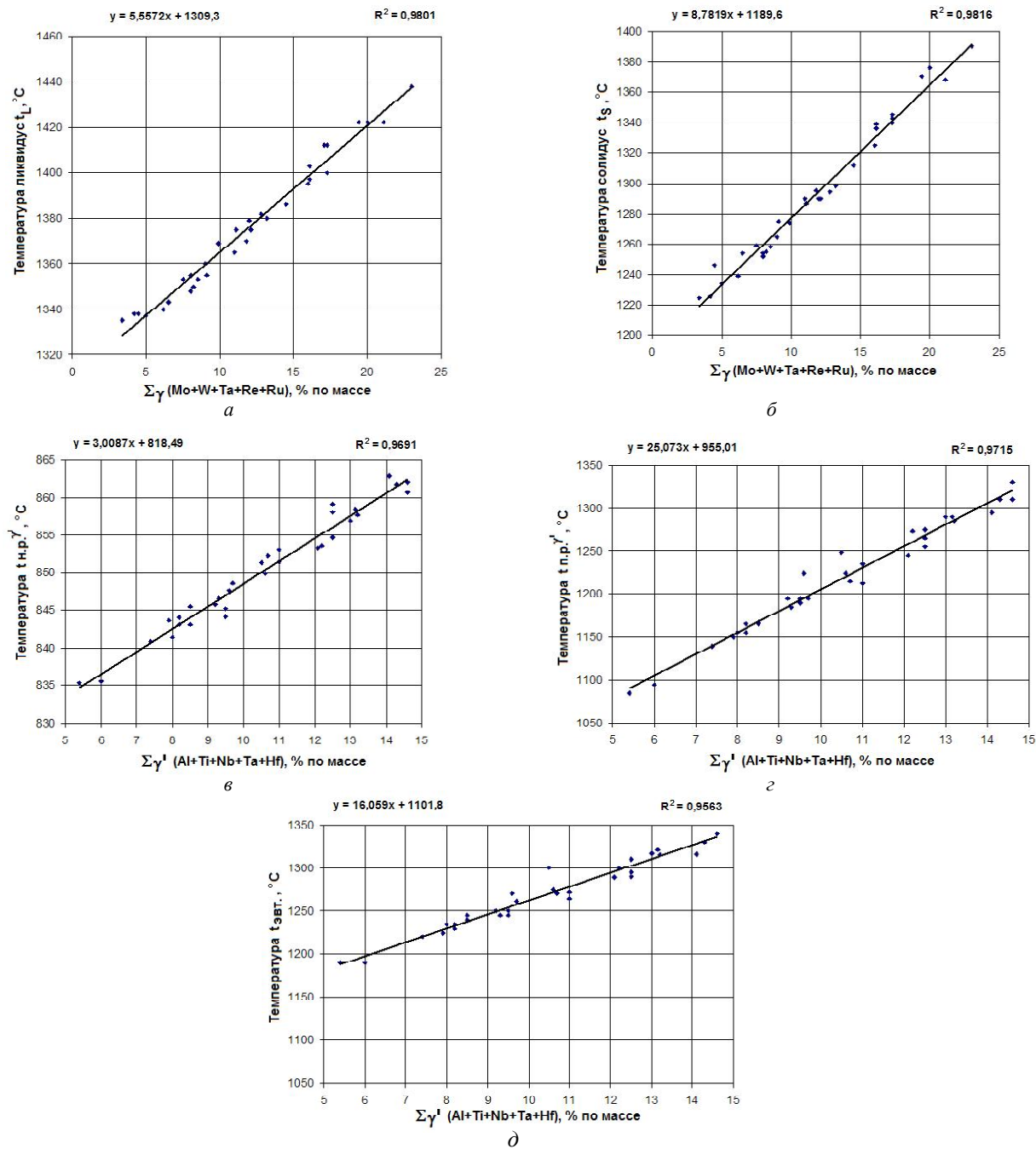


Рис. 3. Математические регрессионные модели для расчета температур t_L , t_S по величине ΣC_i^γ и температур $t_{ЭВТ}$, $t_{П.Р.}^\gamma$, $t_{H.P.}^\gamma$ по величине ΣC_i^γ в составе литейных ЖНС

Таблица 9 – Математические модели для расчета средней скорости коррозии V_q^t и критической температуры $t_{КРИТ.}$ коррозии для литейных ЖНС

Расчетный параметр	Единица измерения	Коэффициент детерминированности, R^2	Вид регрессионной модели (группа 5)
$П_{КС}$	–	–	$П_{КС} = \sqrt{Cr} \cdot (Ti / Al)$
$V_q^{800} \cdot 10^4$	$\Gamma / \text{м}^2 \cdot \text{с}$	0,9187	$V_q^{800} \cdot 10^4 = 17,076 \exp^{-0,9364 \cdot П_{КС}}$
$V_q^{850} \cdot 10^3$	$\Gamma / \text{м}^2 \cdot \text{с}$	0,9123	$V_q^{850} \cdot 10^3 = 27,645 \exp^{-0,8792 \cdot П_{КС}}$
$V_q^{900} \cdot 10^3$	$\Gamma / \text{м}^2 \cdot \text{с}$	0,9374	$V_q^{900} \cdot 10^3 = 76,395 \exp^{-0,8034 \cdot П_{КС}}$
$V_q^{950} \cdot 10^3$	$\Gamma / \text{м}^2 \cdot \text{с}$	0,9293	$V_q^{950} \cdot 10^3 = 94,478 \exp^{-0,7229 \cdot П_{КС}}$
$t_{КРИТ.}$	$^{\circ}\text{C}$	0,9806	$t_{КРИТ.} = 677,22 (П_{КС})^{0,1405}$

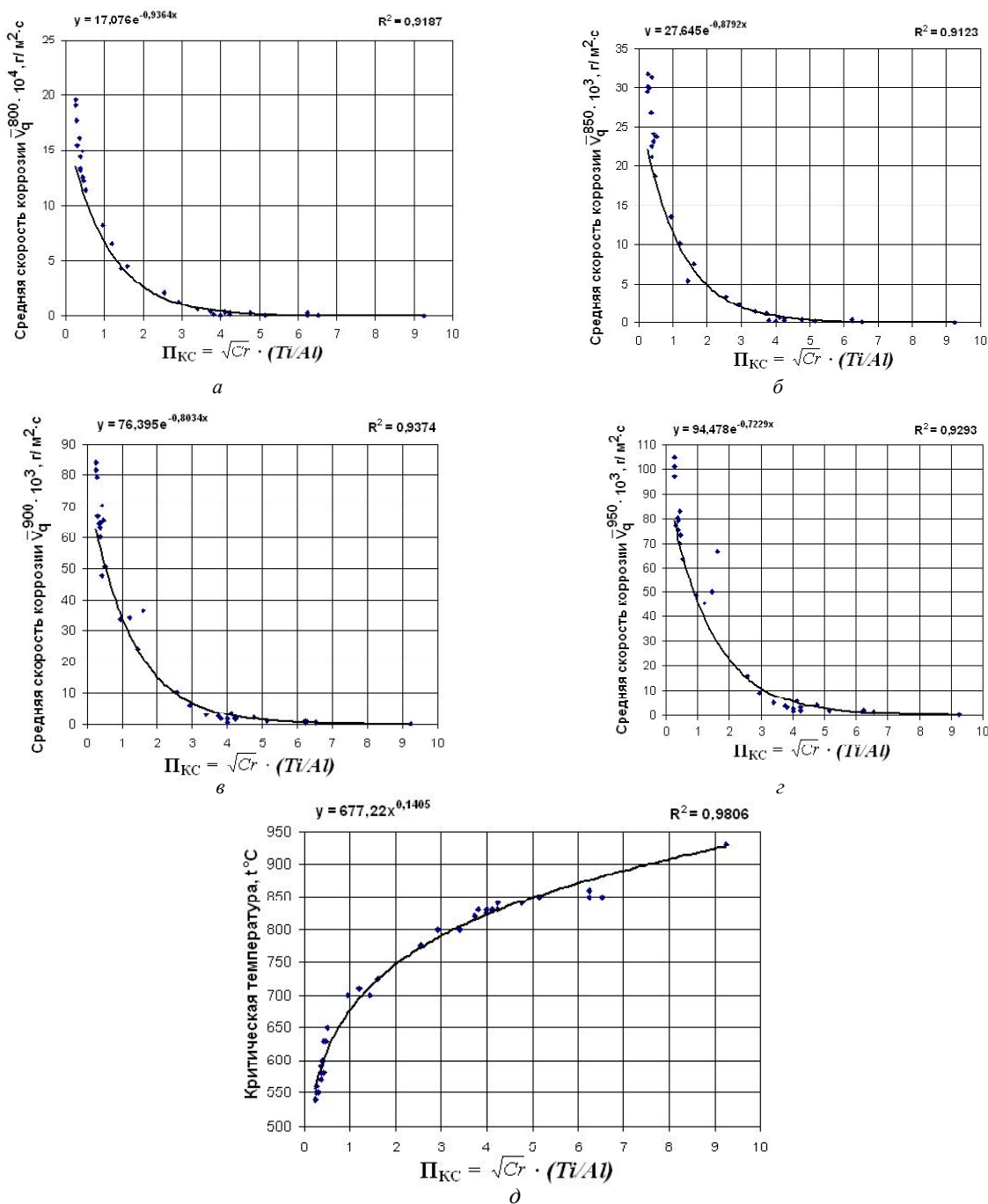


Рис. 4. Математические регрессионные модели для расчета средней скорости коррозии V_q^t и критической температуры $t_{КРИТ.}$ по величине параметра коррозии Π_{KC} литейных ЖНС:

$$a - V_q^{800}; \text{ б} - V_q^{850}; \text{ в} - V_q^{900}; \text{ г} - V_q^{950}; \text{ д} - t_{КРИТ.}$$

Известно [5, 9, 10–12], что зависимость коррозионных процессов от температуры описывается общим экспоненциальным уравнением вида $\bar{V}_q = V_0 \cdot \exp^{-Q/RT}$. Из рисунка 4 видно, что наиболее оптимально зависимость средней скорости коррозии V_q^t (группа 5) от параметра коррозии Π_{KC} исследованных ЖНС при разных температурах описывается экспоненциальной функцией, имеющей общий вид $y = a \exp^{-bx}$.

Из рисунка 4 также видно, что наиболее оптимально зависимость критической температуры коррозии

$t_{КРИТ.}$ (группа 5) от величины параметра коррозии Π_{KC} исследованных ЖНС описывается степенной функцией, имеющей общий вид $y = ax^b$.

В таблице 10 приведены сравнительные результаты расчетной средней скорости коррозии V_q^t для температур 800, 850, 900 и 950 °С, а также критической температуры $t_{КРИТ.}$ (группа 5), которые проводились по апробированным математическим регрессионным моделям, в сравнении с экспериментальными данными для сплава ЗМИ-3У [23].

Таблиця 10 – Сравнительные значения расчетных и экспериментальных значений коррозионных параметров (группа 5) при разных температурах для сплава ЗМИ-3У [23]

Сплав ЗМИ-3У	Коррозионные параметры, г / м ² ·с					
	$P_{КС}$	$V_q^{800} \cdot 10^4$	$V_q^{850} \cdot 10^3$	$V_q^{900} \cdot 10^3$	$V_q^{950} \cdot 10^3$	$t_{КРИТ.}, ^\circ\text{C}$
Расчет по РМ	5,15	0,14	0,30	1,22	2,28	852,6
Эксперимент	–	0,10	0,15	1,14	1,85	~ 850

Таблиця 11 – Математические модели для расчета количества основной упрочняющей фазы $V_{\gamma'}^t$ (группа 6) в литейных ЖНС при разных температурах

Расчетный параметр	Единица измерения	R^2	Вид регрессионной модели (группа 6)
$\Sigma C_i^{\gamma'}$	%, масс.		$\Sigma C_i^{\gamma'} = \text{Al} + \text{Ti} + \text{Nb} + \text{Ta} + \text{Hf}$
$V_{\gamma'}^{20}$	%, масс.	0,9671	$V_{\gamma'}^{20} = -0,1028 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 5,0757 (\Sigma C_i^{\gamma'}) + 16,209$
$V_{\gamma'}^{800}$	%, масс.	0,9665	$V_{\gamma'}^{800} = -0,4437 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 12,769 (\Sigma C_i^{\gamma'}) - 26,493$
$V_{\gamma'}^{900}$	%, масс.	0,9677	$V_{\gamma'}^{900} = -0,3556 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 10,892 (\Sigma C_i^{\gamma'}) - 21,033$
$V_{\gamma'}^{1000}$	%, масс.	0,9686	$V_{\gamma'}^{1000} = -0,2879 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 10,259 (\Sigma C_i^{\gamma'}) - 30,409$

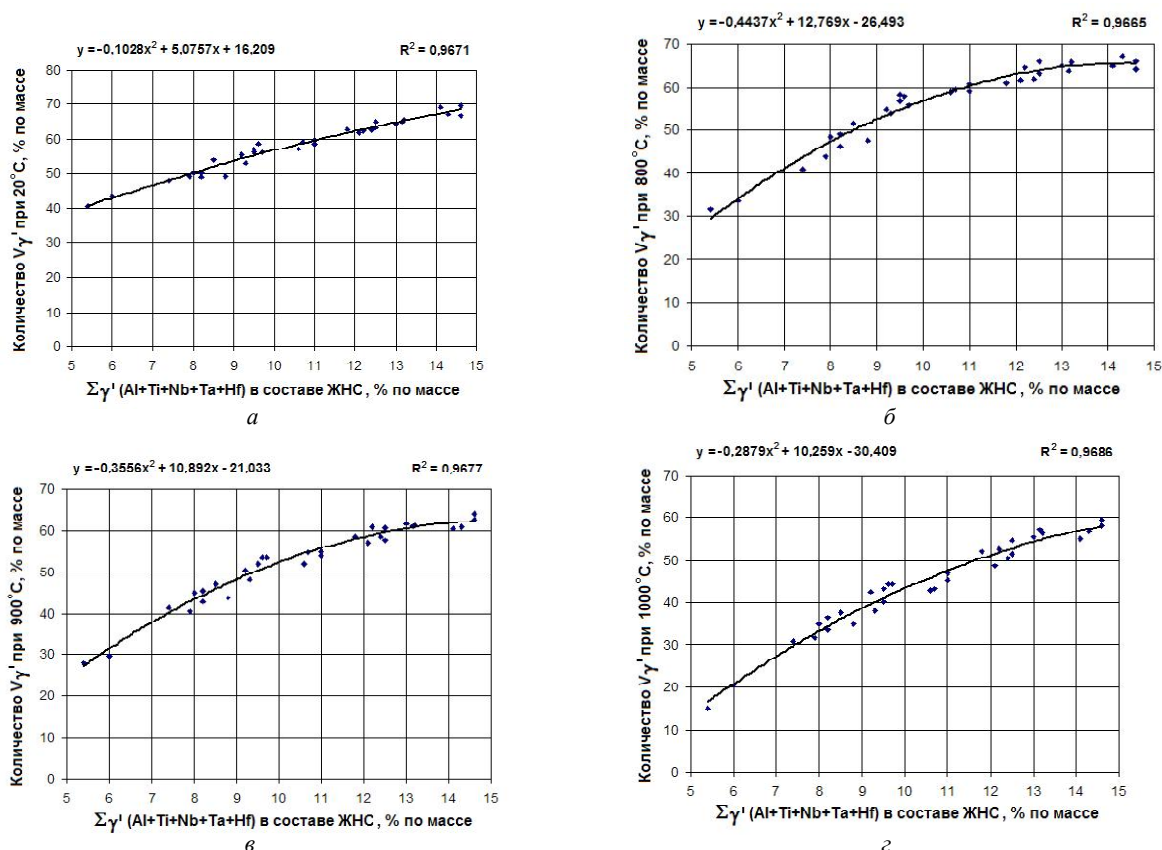


Рис. 5. Математические регрессионные модели для расчета количества $V_{\gamma'}^t$ γ' - фазы по суммарному содержанию $\Sigma C_i^{\gamma'}$ образующих элементов в составе ЖНС: а – 20 °C; б – 800 °C; в – 900 °C; з – 1000 °C

В таблице 11 и на рисунке 5 представлены математические регрессионные модели (РМ) для расчета количества основной упрочняющей γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ (группа 6) при разных температурах, полученные в результате математической обработки экспериментальных данных исследованных литейных ЖНС.

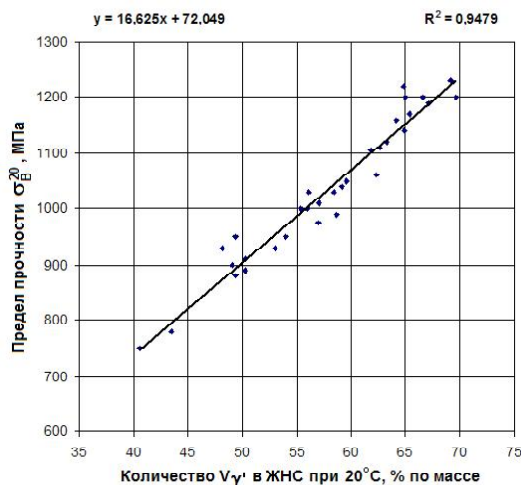
Из таблицы 11 и рисунка 5 видно, что зависимость количества основной упрочняющей γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ (группа 6) от суммарного содержания γ' - образующих элементов $\Sigma C_i^{\gamma'}$ при разных температурах в исследованных ЖНС наиболее оптимально описывается квадра-

тичной функцией, имеющей вид: $y = -ax^2 + bx + c$ (квадратичный полином второй степени).

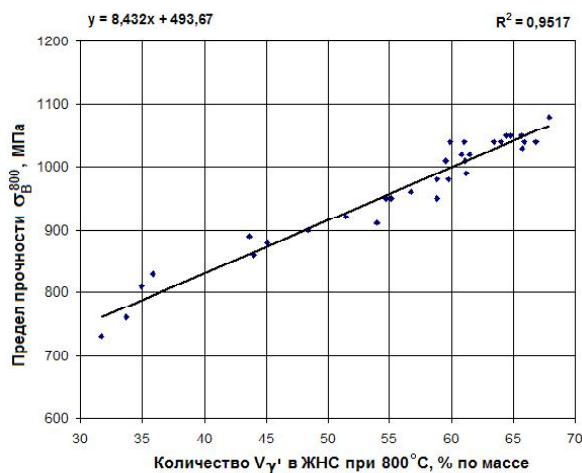
В таблице 12 и на рисунке 6 представлены математические регрессионные модели для расчета предела кратковременной прочности σ_B^t (группа 6) по количеству основной упрочняющей γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ для нормальной и стандартных повышенных температур, полученные в результате математической обработки экспериментальных данных и апробированных на исследованных литейных ЖНС.

Таблица 12 – Математические модели для расчета предела кратковременной прочности σ_B^t (группа б) по количеству упрочняющей фазы $V_{\gamma'}^t$ литейных ЖНС

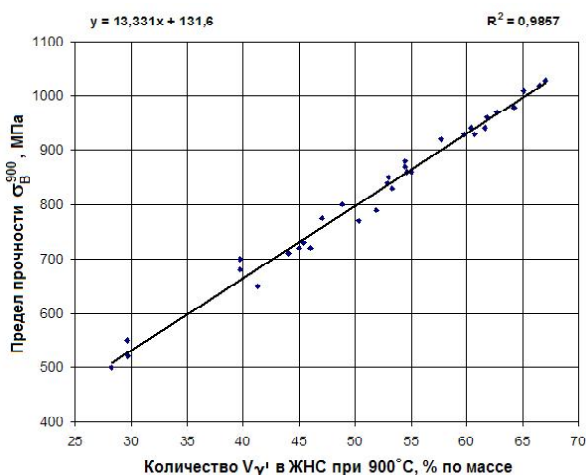
Расчетный параметр	Единица измерения	Коэффициент детерминированности, R^2	Вид регрессионной модели (группа б)
σ_B^{20}	МПа	0,9479	$\sigma_B^{20} = 16,625 (V_{\gamma'}^{20}) + 72,049$
σ_B^{800}	МПа	0,9517	$\sigma_B^{800} = 8,432 \cdot (V_{\gamma'}^{800}) + 493,67$
σ_B^{900}	МПа	0,9857	$\sigma_B^{900} = 13,331 (V_{\gamma'}^{900}) + 131,60$
σ_B^{1000}	МПа	0,9461	$\sigma_B^{1000} = 9,0038 (V_{\gamma'}^{1000}) + 164,07$



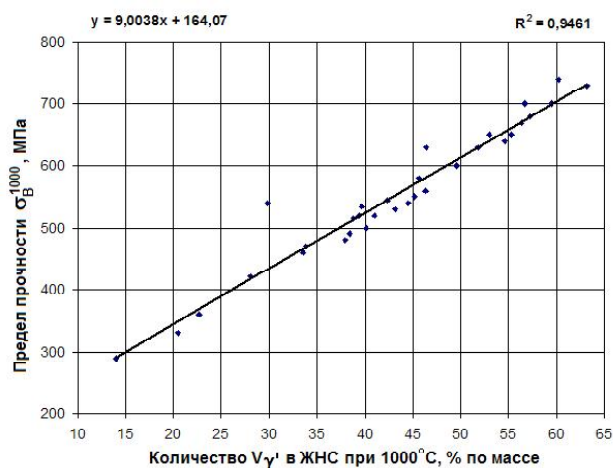
а



б



в



г

Рис. 6. Математические регрессионные модели для расчета предела кратковременной прочности σ_B^t по количеству γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ в литейных ЖНС: а – 20 °С; б – 800 °С; в – 900 °С; г – 1000 °С

На рисунке 7 и в таблице 13 представлены математические регрессионные модели для расчета предела 100- и 1000 часовой длительной прочности σ_{τ}^t (группа б) по количеству основной упрочняющей γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ для повышенных стандартных температур, полученные в результате математической обработки экспериментальных данных и апробированных на исследованных литейных ЖНС.

Из рисунков 6, 7 и таблиц 12, 13 видно, что зависимость пределов кратковременной σ_B^t и длительной σ_{τ}^t прочности от количества основной упрочняющей

γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ (группа б) при разных температурах наиболее оптимально описывается линейной функцией, имеющей вид: $y = ax + b$. В таблицах 14, 15 представлены расчетные значения количества основной упрочняющей фазы $V_{\gamma'}^t$, а также пределов кратковременной σ_B^t и длительной σ_{τ}^t прочности (группа б), которые проводились по полученным математическим регрессионным моделям, представленным на рисунках 5–7 и в таблицах 10–12, в сравнении с экспериментальными данными для сплава ЗМИ-3У [23].

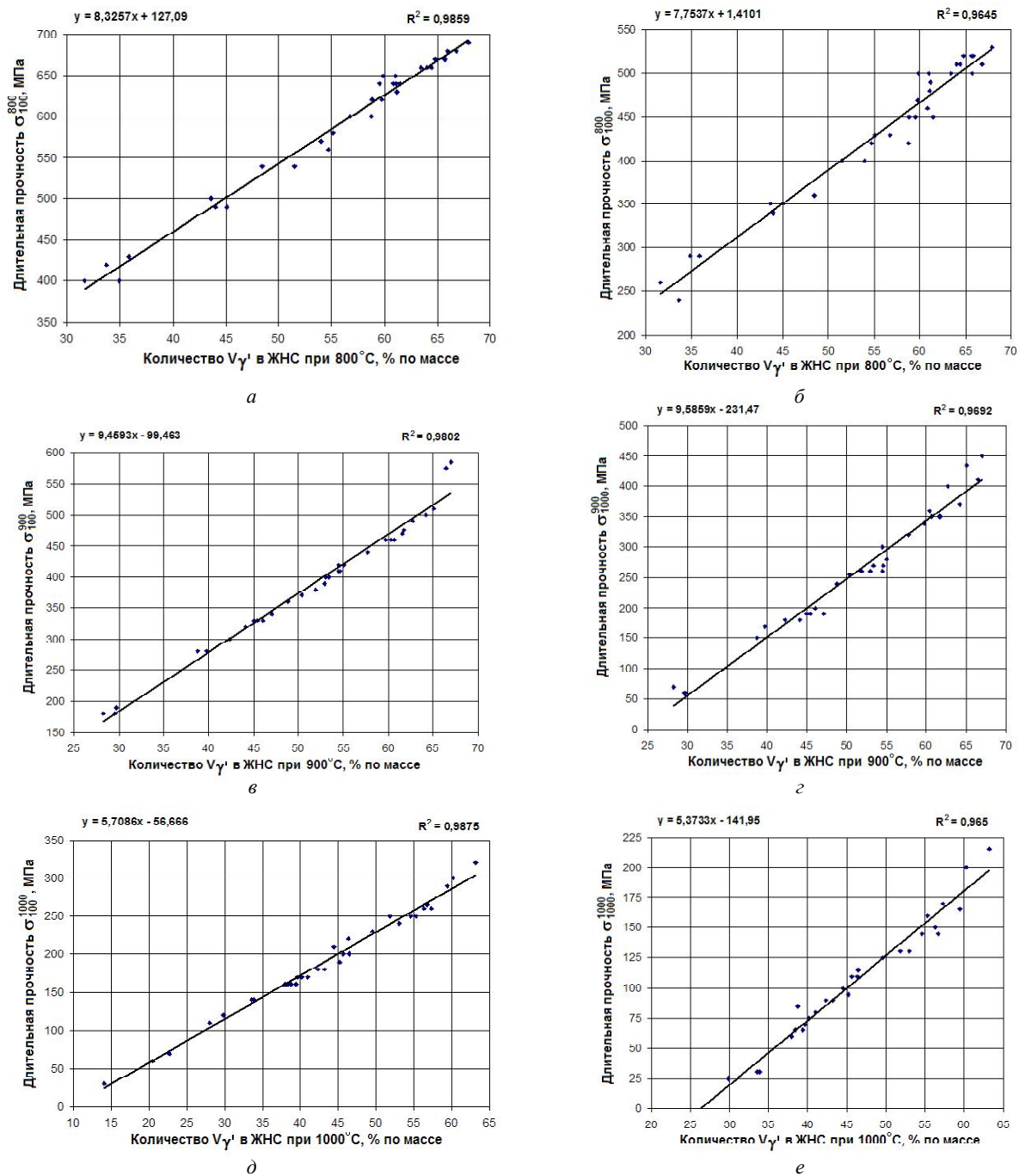


Рис. 7. Математические регрессионные модели для расчета предела 100- и 1000- часовой длительной прочности σ_{τ}^t по количеству γ' - фазы $V\gamma'$ в литейных ЖНС: а – σ_{100}^{800} ; б – σ_{1000}^{800} ; в – σ_{100}^{900} ; г – σ_{1000}^{900} ; д – σ_{100}^{1000} ; е – σ_{1000}^{1000}

Таблица 13 – Математические модели для расчета 100- и 1000- часовой длительной прочности σ_{100} и σ_{1000} (группа 5) по количеству фазы $V\gamma'$ в литейных ЖНС

Расчетный параметр	Единица измерения	Коэффициент детерминированности, R^2	Вид регрессионной модели (группа 6)
σ_{100}^{800}	МПа	0,9859	$\sigma_{100}^{800} = 8,3257 (V\gamma'^{800}) + 127,09$
σ_{100}^{900}	МПа	0,9802	$\sigma_{100}^{900} = 9,4593 (V\gamma'^{900}) - 99,463$
σ_{100}^{1000}	МПа	0,9875	$\sigma_{100}^{1000} = 5,7086 (V\gamma'^{1000}) - 56,666$
σ_{1000}^{800}	МПа	0,9645	$\sigma_{1000}^{800} = 7,7537 (V\gamma'^{800}) + 1,4101$
σ_{1000}^{900}	МПа	0,9692	$\sigma_{1000}^{900} = 9,5859 (V\gamma'^{900}) - 231,47$
σ_{1000}^{1000}	МПа	0,9650	$\sigma_{1000}^{1000} = 5,3733 (V\gamma'^{1000}) - 141,95$

Таблица 14 – Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений предела кратковременной прочности σ_B^t (группа б) для сплава ЗМИ-3У [23]

Сплав ЗМИ-3У	Количество γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ (% по массе) и предел прочности σ_B^t , МПа								
	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$V_{\gamma'}^{20}$	$V_{\gamma'}^{800}$	$V_{\gamma'}^{900}$	$V_{\gamma'}^{1000}$	σ_B^{20}	σ_B^{800}	σ_B^{900}	σ_B^{1000}
Расчет по РМ	8,2	50,9	48,4	44,4	34,4	918,6	901,6	723,1	473,4
Эксперимент	8,2	44-52	–	–	–	920	900	–	–

Таблица 15 – Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений пределов σ_{100} и σ_{1000} длительной прочности (группа б) для сплава ЗМИ-3У [23]

Сплав ЗМИ-3У	Количество γ' - фазы $V_{\gamma'}^t$ (%) и предел длительной прочности σ_{τ}^t , МПа									
	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$V_{\gamma'}^{800}$	$V_{\gamma'}^{900}$	$V_{\gamma'}^{1000}$	σ_{100}^{800}	σ_{1000}^{800}	σ_{100}^{900}	σ_{1000}^{900}	σ_{100}^{1000}	σ_{1000}^{1000}
Расчет по РМ	8,2	48,38	44,37	34,36	509,9	376,5	320,2	193,9	139,4	42,6
Эксперимент	8,2	-	-	-	491	392	300	199	–	–

Таким образом, в разработанной экспрессной методике КРАМ реализован новый концептуальный подход, включающий в алгоритм наряду с традиционными методами ряд полученных математических РМ, позволяющих достоверно проводить прогнозирующие расчеты важнейших параметров, определяющих работоспособность литейных ЖНС. Экспрессный метод КРАМ позволяет проектировать литейные ЖНС с требуемым уровнем служебных характеристик путем многокритериальной оптимизации химического состава, без проведения многочисленных промежуточных экспериментов.

Выводы

1. Сравнительный анализ полученных результатов структурной стабильности (группа 1) для литейных ЖНС показал, что полученные математические РМ можно с высокой степенью достоверности применять для прогнозирующих расчетов параметров $\bar{N}_{V_{\gamma'}}$ и $\bar{M}d_{\gamma'}$ взамен традиционных методов *PHASCOMP* и *New PHASCOMP*. Показана возможность применения ΔE - метода для расчета параметра $\bar{M}d_C$.

2. По структурно-фазовому составу (группа 2), а также физическим параметрам (группа 3) исследованных литейных ЖНС, сравнительный анализ экспериментальных данных показал принципиальную возможность использования расчетных данных, полученных CALPHAD-методом.

3. Сравнительный анализ экспериментальных данных показал, что полученные математические РМ можно применять с высокой степенью достоверности для прогнозирующих расчетов температурных параметров (группа 4) – t_P , t_S , Δt_{KP} по суммарному количеству γ' - твердорастворных упрочнителей – $\Sigma C_i^{\gamma'}$, а также – $t_{ЭВТ}$, $t_{П.Р.}^{\gamma'}$, $t_{Н.Р.}^{\gamma'}$, $\Delta t_{ТО}$ по суммарному количеству γ' - образующих элементов $\Sigma C_i^{\gamma'}$.

4. Сравнительный анализ экспериментальных данных показал, что полученные математические РМ можно применять с высокой степенью достоверности для прогнозирующих расчетов средней скорости коррозии V_q^t и критической температуры коррозии $t_{КРИТ.}$ (группа 5) по параметру коррозии Π_{KC} при проектировании коррозионностойких литейных ЖНС.

5. Сравнительный анализ экспериментальных результатов показал, что полученные математические РМ можно с высокой степенью достоверности применять для прогнозирующих расчетов количества γ' - фазы $V_{\gamma'}$ по параметру $\Sigma C_i^{\gamma'}$, а также для расчетов по параметру $V_{\gamma'}$ прочностных характеристик – пределов кратковременной σ_B^t и длительной прочности σ_{τ}^t (группа б) при разных температурах.

6. Показан новый концептуальный подход к многокритериальной оптимизации составов при проектировании литейных ЖНС с требуемым уровнем служебных характеристик, реализованный в разработанной экспрессной методике КРАМ.

Список литературы

1. Каблов Е. Н. Литейные жаропрочные сплавы. Эффект С. Т. Кишкина : науч.-техн. сб. : к 100-летию со дня рождения С. Т. Кишкина / Под общ. ред. Е. Н. Каблова. – М. : Наука, 2006. – 272 с.
2. Каблов Е. Н. 75 лет. Авиационные материалы. Избранные труды «ВИАМ» 1932–2007 / Юбилейный научно-технический сборник под общ. ред. Е.Н. Каблова. – М. : «ВИАМ», 2007. – 439 с.
3. Шалин Р. Е. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / [Р. Е. Шалин, И. Л. Светлов, Е. Б. Качанов и др.]. – М. : Машиностроение, 1997. – 336 с.
4. Harada H. Phase calculation and its use in alloy design program for nickel-base superalloys / H. Harada, K. Ohno, T. Yamagata et. al. // Superalloys: A publ. of the Met. Soc. of AIME (USA). Champion (Pennsylvania) TMS. – 1988. – P. 733–742.
5. Симс Ч. Т. Суперсплавы II. Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок / Ч. Т. Симс, Н. С. Столофф, У. К. Хагель ; пер. с англ. : в 2-х кн. : под ред. Р.Е. Шалина. – М. : Металлургия, 1995. – 384 с.
6. Логунов А.В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе Часть – II / А. В. Логунов, Ю. Н. Шмотин, Д. В. Данилов // Технология металлов. – 2014. – № 6. – С. 3–10.
7. Логунов А. В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе Часть – III / А. В. Логунов, Ю. Н. Шмотин, Д. В. Данилов // Технология металлов. – 2014. – № 7. – С. 3–11.

8. Логунов А. В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе Часть – I / А. В. Логунов, Ю. Н. Шмотин, Д. В. Данилов // Технология металлов. – 2014. – № 5. – С. 3–9.
9. Котсорадис Д. Жаропрочные сплавы для газовых турбин. Материалы международной конференции / Д. Котсорадис, П. Феликс, Х. Фишмайстер и др. ; пер. с англ. под ред. Р. Е. Шалина. – М. : Металлургия, 1981. – 480 с.
10. Научные основы легирования жаропрочных никелевых сплавов, стойких против высокотемпературной коррозии (ВТК) / [А. Д. Коваль, С. Б. Беликов, Санчугов Е. Л., А. Г. Андриенко]. – Запорож. машиностр. Ин-т, 1990. – 56 с. – (Препринт / КИЕВ УМК ВО ; ЗМИ 1990).
11. Никитин В.И. Коррозия и защита лопаток газовых турбин / Никитин В. И. – Л. : Машиностроение, 1987. – 272 с.
12. Никитин В.И. Влияние состава никелевых сплавов на их коррозионную стойкость в золе газотурбинного топлива / В. И. Никитин, М. Б. Ревзюк, И. П. Комисарова // Труды ЦКТИ им. И. И. Ползунова. – Л., 1978. – Вып. 158. – С. 71–74.
13. Morinaga M. New PHACOMP and its application to alloy design / M. Morinaga, N. Yukawa, H. Adachi, H. Ezaki // Superalloys 1984 (eds. M. Gell et al.), AIME, 1984. – P. 523–532.
14. Морозова Г. И. Компенсация дисбаланса легирования жаропрочных никелевых сплавов / Г. И. Морозова // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2012. – №12. – С. 52–56.
15. Морозова Г. И. Сбалансированное легирование жаропрочных никелевых сплавов / Г. И. Морозова // Металлы. – 1993. – №1. – С. 38–41.
16. Saunders N. The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys [Текст] / N. Saunders, M. Fahrman, C.J. Small // In «Superalloys 2000» eds. K.A. Green, T.M. Pollock and R.D. Kissinger. – TMS. – Warrendale. – 2000. – 803 p.
17. Caron P. High γ' - solvus new generation nickel-based superalloys for single crystal turbine blade applications / P. Caron // Superalloys 2000. T.M Pollock, etc. A Publ. of the TMS. Seven Springs Mountain Resort in Champion, Pennsylvania // Minerals, Metals & Materials Society. – 2000. – P. 737–746.
18. Жуков А. А. Оценка температуры полного растворения γ' - фазы жаропрочных никелевых сплавов на основе анализа двойных диаграмм состояния / А. А. Жуков, О. А. Смирнова // Заготовительные производства в машиностроении. – 2004. – № 11. – С. 44–47.
19. Жуков А. А. Оценка эксплуатационной пригодности жаропрочных сплавов для ГТД и ГТУ / А. А. Жуков, О. А. Смирнова // Авиационно–космическая техника и технология. – 2005. – № 10 (26). – С. 60–66.
20. Гайдук С. В. Получение прогнозирующих математических моделей для расчета термодинамических параметров литейных жаропрочных никелевых сплавов / С. В. Гайдук, В. В. Кононов, В. В. Куренкова / Современная электрометаллургия. – 2015. – № 4. – С. 31–37.
21. Гайдук С. В. Применение CALPHAD–метода для расчета количества γ' - фазы и прогнозирования длительной прочности литейных жаропрочных никелевых сплавов / С. В. Гайдук, Т. В. Тихомирова / Металлургическая и горнорудная промышленность. – 2015. – № 6. – С. 64–68.
22. Гайдук С. В. Применение аналитических методов для расчета химического состава γ -, γ' - фаз и параметров фазовой стабильности литейных жаропрочных никелевых сплавов / С. В. Гайдук, Т. В. Тихомирова / Авиационно-космическая техника и технология. – Харьков, «ХАИ». – 2015. – № 9 (126). – С. 33–37.
23. Паспорт на жаропрочный коррозионностойкий никелевый сплав ЗМИ–3У (ХН64ВМКЮТ) / А. Д. Коваль, С. Б. Беликов, А. Г. Андриенко и др. : утв. проректор по научной работе Н. С. Гамов. – Запорожье, 1995. – 30 с.
24. Вертоградский В. А. Исследование фазовых превращений в сплавах типа ЖС методом ДТА / В. А. Вертоградский, Т. П. Рыкова // Жаропрочные и жаростойкие стали и сплавы на никелевой основе. – М. : Наука, 1984. – С. 223–227.

Одержано 16.12.2015

Гайдук С.В. Комплексна розрахунково-аналітична методика для проектування ливарних жароміцних нікелевих сплавів

Розроблено комплексну розрахунково-аналітичну методику, що включає в алгоритм як традиційні методики, так і отримані математичні регресійні моделі для прогнозуючих розрахунків найважливіших параметрів, що визначають працездатність ливарних жароміцних нікелевих сплавів. Методика дозволяє без проведення проміжних експериментів шляхом багатокритерійної оптимізації складу проектувати як нові композиції, так і модернізувати склади відомих промислових сплавів з необхідним рівнем службових характеристик.

Ключові слова: жароміцні нікелеві сплави (ЖНС), система легування, критерії (параметри) працездатності, багатокритерійна оптимізація, регресійне рівняння (РР), регресійна модель (РМ), комплексна розрахунково-аналітична методика (КРАМ).

Gayduk S. Comprehensive analytical solution method applied for high-temperature nickel-base cast alloys engineering

A comprehensive analytical solution method, which includes both traditional techniques and obtained mathematical regressive models for forecast calculation of the most important serviceability criteria of high-temperature nickel-base cast alloys in its algorithm, has been developed. This method allows to design new alloys and to improve chemical composition of the known industrial compositions with the required level of service properties by avoiding intermediate tests and using multi-criterion optimization of chemical composition.

Key words: high-temperature nickel-base alloys (HTNA), alloying system, serviceability criteria, multi-criterion optimization, regressive equation (RE), regressive model (RM), comprehensive analytical solution method (CASM).