

# ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЛЕКСНОЙ РАСЧЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ МЕТОДИКИ ДЛЯ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ СОСТАВОВ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

С. В. Гайдук<sup>1</sup>, В. В. Кононов<sup>1</sup>, В. В. Куренкова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Запорожский национальный технический университет.

690063, г. Запорожье, ул. Жуковского, 64. E-mail: rector@zntu.edu.ua

<sup>2</sup>ООО «Патон Турбайн Текнолоджиз».

03028, г. Киев, ул. Ракетная, 26. E-mail: vkurenkova@patontt.com

Разработана комплексная расчетно-аналитическая методика, включающая в алгоритм как традиционные методики, так и полученные математические регрессионные модели для прогнозирующих расчетов параметров, определяющих работоспособность литейных жаропрочных никелевых сплавов. Методика позволяет без проведения промежуточных экспериментов путем многокритериальной оптимизации состава проектировать новые композиции и модернизировать составы известных промышленных сплавов с требуемым уровнем служебных характеристик. Библиогр. 25, табл. 14, ил. 1.

*Ключевые слова:* жаропрочные никелевые сплавы; система легирования; критерии (параметры) работоспособности; многокритериальная оптимизация; регрессионное уравнение; регрессионная модель; комплексная расчетно-аналитическая методика

**Введение.** Наиболее перспективными материалами для высокотемпературного применения в газотурбостроении являются литейные жаропрочные никелевые сплавы (ЖНС). В настоящее время в мире разработаны и применяются, как базовые сплавы для компонентов горячего тракта газотурбинных двигателей (ГТД), сплавы равноосной кристаллизации, направленной кристаллизации и монокристалльные суперсплавы пяти поколений. При разработке новых составов определение эмпирическим путем оптимального химического состава, обеспечивающего требуемый комплекс служебных свойств, достаточно наукоемкая задача, требующая больших временных и финансовых затрат. Поэтому такой подход как «метод проб и ошибок» применительно к сложнолегированным 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 при этом общее число опытных плавок для нахождения 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 концептуаль-

ных 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 сложнолегированных композиций литейных ЖНС, обеспечивающей требуемый уровень служебных характеристик. Дальнейшее развитие научных принципов легирования ЖНС и совершенствование методов их проектирования реализуется с использованием компьютерных технологий [1–8, 10–19], которые 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].

Цель настоящей работы — разработка экспрессной комплексной расчетно-аналитической методики (КРАМ) для проектирования литейных ЖНС, включающей в алгоритм как традиционные методики, так и полученные математические регрессионные модели, позволяющие с высокой степенью достоверности проводить прогнозирую-

щие расчеты по группам важнейших параметров, определяющих работоспособность материалов данного класса.

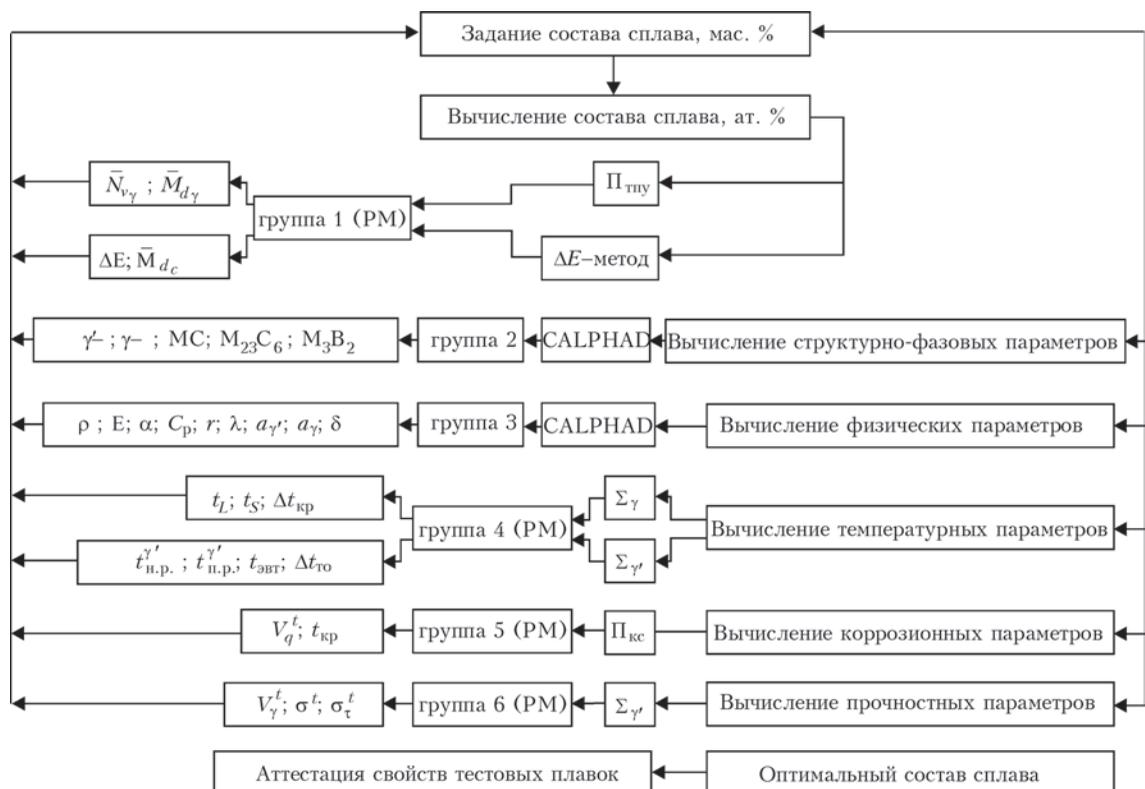
С целью получения прогнозирующих универсальных математических регрессионных моделей (PM) для расчета параметров работоспособности сформирована и обработана база экспериментальных данных широкого номенклатурного ряда литейных ЖНС. Это результаты исследований более 100 композиций серийных отечественных 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],  $\Delta E$ -метод [14, 15].

После математической обработки большого массива экспериментальной базы данных 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, ЖСЗЛС, 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). Выборку сплавов осуществляли с позиций предоставления химических составов с различными системами легирования, охватывающих широкий диапазон по содержанию основных элементов, мас. %: C = 0...0,18; Cr = 2,0...22,5; Co = 3,0...19,0; Al = 1,9...6,2; Ti = 0...5; Mo = 0...6,4; W = 0...12,0; Nb = 0...1,6; Ta = 0...12,0; Hf = 0...1,5; V = 0...1,0; Re = 0...9,0; Ru = 0...6,0, а также экспериментальных данных по группам параметров исследуемых ЖНС [1–3, 9–11].

**Анализ результатов.** В работах [16–23] 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 большой экспериментальной базы данных литейных ЖНС 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.

На рисунке представлен общий алгоритм разработанной методики КРАМ для проектирования литейных ЖНС с требуемым уровнем служебных свойств, включающий наряду с известными методи-



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

**Таблица 1. Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности литейных ЖНС, ат. %**

Расчетный параметр	Условия стабильности	Коэффициент детерминированности, R <sup>2</sup>	Вид РМ (группа 1)
$\Pi_{\text{тн}}$	–	–	$\Pi_{\text{тн}} = [\text{Cr}/(\text{Cr} + \text{Mo} + \text{W})]$
$\bar{N}_{\gamma}$	$\leq 2,45$	0,9112	$N_{\gamma} = 1,7346 (\Pi_{\text{тн}}) + 0,7593$
$Md_{\gamma}$	$\leq 0,93$	0,9813	$Md_{\gamma} = 0,0975 (N_{\gamma}) + 0,6941$
$\Delta E$	$0,00 \pm 0,04$	–	$\Delta E = \sum E_i C_i - 0,036 \sum A_i C_i - 6,28$
$Md_{\epsilon}$	$0,980 \pm 0,008$	0,9886	$Md_{\epsilon} = 0,1879 (\Delta E) + 0,9803$

ками полученные группы РМ для прогнозирующих расчетов важнейших параметров литейных ЖНС.

Основные контролируемые параметры для многокритериальной оптимизации состава при проектировании литейных ЖНС следующие: суммарное количество электронных вакансий в  $\gamma$ -твердом растворе,  $N_{\gamma}$ ; суммарное количество валентных электронов в  $\gamma$ -твердом растворе,  $Md_{\gamma}$ ; параметр дисбаланса системы легирования,  $\Delta E = \pm 0,04$ ; суммарное количество валентных электронов в сплаве,  $Md_{\epsilon}$ ; удельная плотность сплава,  $\rho$  (г/см<sup>3</sup>); мисфит  $\delta = 2(a_{\gamma'} - a_{\gamma}) / (a_{\gamma'} + a_{\gamma})$  (%); температура солидус,  $t_s$  (°C); температура полного растворения  $\gamma'$ -фазы,  $t'_{\text{п.р.}}$  (°C); температура локального плавления эвтектики,  $t'_{\text{эвт}}$  (°C); средняя скорость коррозии,  $v'_q$  (г/м<sup>2</sup>·с); количество упрочняющей  $\gamma'$ -фазы,  $V'_{\gamma'}$  (мас. %); предел кратковременной прочности,  $\sigma'_B$  (МПа); предел длительной прочности,  $\sigma'_T$  (°C) (МПа).

Анализ экспериментальных данных, полученных в отечественной и зарубежной практике на широком спектре промышленных литейных ЖНС, позволил установить зависимость целого ряда групп важнейших характеристик от минимально легирующих комплексов внутри общего химического состава литейных ЖНС. Такими характеристиками сплавов могут выступать: суммарное содержание  $\gamma$ -твердорастворных упрочнителей ( $\Sigma_{\gamma}$ ) и  $\gamma'$ -образующих ( $\Sigma_{\gamma'}$ ) элементов [20], объемное количество ( $V_{\gamma'}$ )  $\gamma'$ -фазы [21], параметр коррозии ( $\Pi_{\text{к}}$ ) [22] и параметры структурной стабильности  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\epsilon}$ ,  $\Delta E$  [23].

**Таблица 2. Значения параметров структурной стабильности для сплава ЗМИ-3У**

Сплав ЗМИ-3У	$\Pi_{\text{тн}}$	$N_{\gamma}$	$Md_{\gamma}$	$\Delta E$	$Md_{\epsilon}$
Расчет по РМ	0,8421	2,2200	0,9106	+0,0362	0,9871
Phacompr	–	2,1431	–	–	–
New Phacompr	–	–	0,9065	–	0,9833
$\Delta E$ -метод	–	–	–	+0,0362	–

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

Математическую обработку расчетных данных по параметрам группы 1 (структурная стабильность) проводили известными методами [5, 9, 10, 13–15], групп 2 и 3 (структурно-фазовые и физические) — CALPHAD-методом [16, 17]. Математическая обработка экспериментальных данных по параметрам групп 4, 5 и 6 (температурным, коррозионным и прочностным) проводили в программном комплексе EXCEL с помощью прикладного пакета «Регрессионный анализ». Это позволило построить графики функций (линии трендов) и получить математические уравнения РМ, которые для каждой конкретной группы оптимально описывают зависимость параметров от величины определенного минимально легирующего комплекса. Полученные универсальные 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.

При математической обработке данных химического состава  $\gamma$ -твердых растворов исследованных литейных ЖНС традиционными методами PHACOMP [5, 9], New PHACOMP [13] получены РМ для расчета параметров их структурной стабильности  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  [23]. Обработка данных по параметру дисбаланса системы легирования исследованных литейных ЖНС известным  $\Delta E$ -методом [14, 15] дала возможность получить РМ для расчета параметра структурной стабильности  $\bar{M}d_{\epsilon}$  по величине параметра  $\Delta E$  [23]. В табл. 1 представлены полученные математические РМ для расчета параметров (группа 1) структурной стабильности  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  по величине отношения  $\text{Cr}/\text{Cr} + \text{Mo} + \text{W} = \Pi_{\text{тн}}$ , а параметра  $\bar{M}d_{\epsilon}$  по величине дисбаланса системы легирования  $\Delta E$ , апробированные на исследованных литейных ЖНС.

Зависимости параметров структурной стабильности (группа 1)  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  от величины соотношения элементов в сплаве  $[\text{Cr}/\text{Cr} + \text{Mo} + \text{W}] = \Pi_{\text{тн}}$  (ат. %), а также параметра  $\bar{M}d_{\epsilon}$  от

Таблица 3. Химический состав сплава ЗМИ-3У среднего уровня легирования, мас. %

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	Основа

Таблица 4. Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений структурно-фазовых параметров для сплава ЗМИ-3У, мас. %

Тип фаз	Количество фаз		Расчетный химический состав фаз при 20 °С									
	расчетное	экспериментальное	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 <sub>23</sub> C <sub>6</sub>	2,05	1,9	5,10	1,01	71,54	–	–	13,45	5,13	–	–	3,77
M <sub>3</sub> B <sub>2</sub>	0,18	0,2	–	–	21,84	–	–	63,88	6,02	8,08	–	0,18

Таблица 5. Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений физических параметров для сплава ЗМИ-3У при 20 °С

Значения параметров	ρ, г/см <sup>3</sup>	E, ГПа	α · 10 <sup>6</sup> , 1/К	C <sub>p</sub> , Дж/г·К	r · 10 <sup>6</sup> , Ом·м	λ, Вт/м·К	a <sub>γ</sub> , А°	a <sub>γ'</sub> , А°	δ, %
Расчетные	8,29	212,5	12,23	0,430	0,151	10,42	3,5850	3,5780	–0,20
Экспериментальные	8,28	224,0	12,20	0,436	0,148	8,6	3,5874	3,5770	–0,29

Примечание. ρ — удельная плотность; E — модуль упругости Юнга; α — коэффициент термического расширения; C<sub>p</sub> — удельная теплоемкость; r — удельное электросопротивление; λ — теплопроводность; a<sub>γ</sub> — параметр кристаллической решетки γ'-фазы; a<sub>γ'</sub> — параметр кристаллической решетки γ-твердого раствора; δ — размерное несоответствие параметров кристаллических решеток γ- и γ'-фаз (мисфит).

величины дисбаланса системы легирования ΔE в исследованных ЖНС наиболее оптимально описываются линейной функцией, имеющей общий вид:  $y = ax + b$  (табл. 1). Для конкретного промышленного сплава ЗМИ-3У расчет параметров структурной стабильности (группа 1) по РМ сравнивали с данными, полученными традиционными методами Phasomp, New Phasomp и ΔE-метода (табл. 2) [24].

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

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 представлены в табл. 3–5. Они приведены для промышленного сплава ЗМИ-3У среднего уровня

легирования, взятого в качестве наглядного примера [24], и это позволило спрогнозировать его наиболее вероятный фазовый и химический составы и количество фаз.

Регрессионные модели для расчета температурных параметров (группа 4), полученных на основе

Таблица 6. Математические регрессионные модели для расчета температурных параметров литейных ЖНС

Расчетный параметр	Коэффициент детерминированности, R <sup>2</sup>	Вид РМ (группа 4)
Σ C <sub>i</sub> <sup>γ</sup> , мас. %	–	Σ C <sub>i</sub> <sup>γ</sup> = Mo + W + Ta + Re + Ru
t <sub>L</sub> , °С	0,9801	t <sub>L</sub> = 5,5572 (Σ C <sub>i</sub> <sup>γ</sup> ) + 1309,3
t <sub>S</sub> , °С	0,9816	t <sub>S</sub> = 8,7819 (Σ C <sub>i</sub> <sup>γ</sup> ) + 1189,6
Σ C <sub>i</sub> <sup>γ'</sup> , мас. %	–	Σ C <sub>i</sub> <sup>γ'</sup> = Al + Ti + Nb + Ta + Hf
t <sub>энт</sub> , °С	0,9563	t <sub>энт</sub> = 16,059 (Σ C <sub>i</sub> <sup>γ'</sup> ) + 1101,8
t <sub>п.р.</sub> <sup>γ'</sup> , °С	0,9715	t <sub>п.р.</sub> <sup>γ'</sup> = 25,073 (Σ C <sub>i</sub> <sup>γ'</sup> ) + 955,01
t <sub>п.р.</sub> <sup>γ</sup> , °С	0,9691	t <sub>п.р.</sub> <sup>γ</sup> = 3,0087 (Σ C <sub>i</sub> <sup>γ'</sup> ) + 818,49

Таблица 7. Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений температурных параметров для сплава ЗМИ-3У, °С

Значения параметров	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$t_L$	$t_S$	$\Delta t_{кр} = t_L - t_S$	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$t_{эвт}$	$t_{н.п.}^{\gamma'}$	$t_{н.п.}^{\gamma'}$	$\Delta t_{то} = t_{эвт} - t_{н.п.}^{\gamma'}$
Расчетные по РМ	8,1	1354,3	1260,7	93,6	8,2	1233,5	1160,6	843,2	72,9
Экспериментальные	8,1	1350,0	1255,0	95,0	8,2	1235,0	1167,0	—	68,0

Таблица 8. Математические модели для расчета средней скорости коррозии  $v_q^t$  и критической температуры  $t_{кр}$  коррозии для литейных ЖНС

Расчетный параметр, г/м <sup>2</sup> ·с	Коэффициент детерминированности, R <sup>2</sup>	Вид РМ (группа 5)
$P_{кк}$	—	$P_{кк} = \sqrt{Cr}$ (Ti/Al)
$v_q^{800} \cdot 10^4$	0,9187	$v_q^{800} \cdot 10^4 = 17,076 \exp^{-0,9364 \cdot P_{кк}}$
$v_q^{850} \cdot 10^3$	0,9123	$v_q^{850} \cdot 10^3 = 27,645 \exp^{-0,8792 \cdot P_{кк}}$
$v_q^{900} \cdot 10^3$	0,9374	$v_q^{900} \cdot 10^3 = 76,395 \exp^{-0,8034 \cdot P_{кк}}$
$v_q^{950} \cdot 10^3$	0,9293	$v_q^{950} \cdot 10^3 = 94,478 \exp^{-0,7229 \cdot P_{кк}}$
$t_{кр}, ^\circ C$	0,9806	$t_{кр} = 677,22 (P_{кк})^{0,1405}$

Таблица 9. Сравнительные значения расчетных и экспериментальных значений коррозионных параметров (г/м<sup>2</sup>·с) при разных температурах для сплава ЗМИ-3У

Значения параметров	$P_{кк}$	$v_q^{800} \cdot 10^4$	$v_q^{850} \cdot 10^3$	$v_q^{900} \cdot 10^3$	$v_q^{950} \cdot 10^3$	$t_{кр}, ^\circ C$
Расчетные по РМ	5,15	0,14	0,30	1,22	2,28	852,6
Экспериментальные	—	0,10	0,15	1,14	1,85	~ 850

математической обработки экспериментальных данных исследованных ЖНС методом дифференциального термического анализа (ДТА), представлены в табл. 6. [20], а данные расчетных значений температурных параметров по РМ (табл. 6) в срав-

нении с экспериментальными данными для сплава ЗМИ-3У [24] — в табл. 7.

Из табл. 6 следует, что зависимость температур ликвидус  $t_L$  и солидус  $t_S$  от суммы  $\gamma$ -твердорастворных упрочнителей  $\Sigma C_i^{\gamma'}$ , а также температур начала оплавления эвтектики  $\gamma/\gamma' t_{эвт}$ , начала  $t_{н.п.}^{\gamma'}$  и полного растворения  $t_{н.п.}^{\gamma'}$  основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы от суммы  $\gamma'$ -образующих элементов  $\Sigma C_i^{\gamma'}$  (группа 4) хорошо коррелируют и оптимально описываются линейной функцией, имеющей общий вид  $y = ax + b$ .

Математические РМ для расчета средней скорости коррозии  $v_q^t$  и критической температуры  $t_{кр}$  (группа 5) по величине параметра коррозии  $P_{кк}$  представлены в табл. 8. РМ были получены ранее в результате математической обработки базы экспериментальных данных и апробированы на исследованных ЖНС [22].

Известно [5, 9, 10–12], что зависимость коррозионных процессов от температуры описывается общим экспоненциальным уравнением вида  $\bar{V}q = v_0 \exp^{-Q/RT}$ . Наиболее оптимально зависимость средней скорости коррозии  $v_q^t$  (группа 5) от параметра коррозии  $P_{кк}$  исследованных ЖНС при разных температурах описывается экспоненциальной функцией, имеющей общий вид  $y = a \exp^{-bx}$ , а зависимость критической температуры коррозии  $t_{кр}$  (группа 5) от величины параметра коррозии  $P_{кк}$  исследованных литейных ЖНС степенной функцией, имеющей общий вид  $y = ax^b$  (табл. 8).

В табл. 9 приведены сравнительные результаты расчетов средней скорости коррозии  $v_q^t$  для температур 800, 850, 900 и 950 °С, а также критической температуры коррозии  $t_{кр}$  (группа 5), которые проводили по апробированному математическим РМ, в сравнении с экспериментальными данными для сплава ЗМИ-3У [24].

РМ для расчета количества основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}^t$  (группа 6) при разных температурах, полученные в результате математической обработки экспериментальных данных исследованных литейных ЖНС при-

Таблица 10. Математические модели для расчета количества основной упрочняющей фазы  $V_{\gamma'}^t$  в литейных ЖНС при разных температурах

Расчетный параметр, мас. %	Коэффициент детерминированности, R <sup>2</sup>	Вид РМ (группа 6)
$\Sigma C_i^{\gamma'}$	—	$\Sigma C_i^{\gamma'} = Al + Ti + Nb + Ta + Hf$
$V_{\gamma'}^{20}$	0,9671	$V_{\gamma'}^{20} = -0,1028 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 5,0757 (\Sigma C_i^{\gamma'}) + 16,209$
$V_{\gamma'}^{800}$	0,9665	$V_{\gamma'}^{800} = -0,4437 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 12,769 (\Sigma C_i^{\gamma'}) - 26,493$
$V_{\gamma'}^{900}$	0,9677	$V_{\gamma'}^{900} = -0,3556 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 10,892 (\Sigma C_i^{\gamma'}) - 21,033$
$V_{\gamma'}^{1000}$	0,9686	$V_{\gamma'}^{1000} = -0,2879 (\Sigma C_i^{\gamma'})^2 + 10,259 (\Sigma C_i^{\gamma'}) - 30,409$

ведены в табл. 10. Из таблицы видно, что зависимость количества основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}^t$  (группа б) от суммарного содержания  $\gamma'$ -образующих элементов  $\Sigma C_i^{\gamma'}$  при разных температурах в исследованных ЖНС наиболее оптимально описывается квадратичной функцией, имеющей вид  $y = -ax^2 + bx + c$  (квадратичный полином второй степени).

РМ для расчета предела кратковременной прочности  $\sigma_B^t$  (группа б) (табл. 11) и предела 100- и 1000-часовой длительной прочности  $\sigma_{100}^t$  (группа б) (табл. 12) определяли по количеству основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}^t$  для нормальной и повышенных температур, полученных в результате математической обработки экспериментальных данных и апробированных на исследованных литейных ЖНС [21].

Зависимость пределов кратковременной  $\sigma_B^t$  и длительной  $\sigma_{100}^t$  прочности от количества основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}^t$  при разных температурах наиболее оптимально описывается линейной функцией, имеющей вид  $y = ax + b$ .

Для сплава ЗМИ-3У расчетные значения количества основной упрочняющей фазы  $V_{\gamma'}^t$ , а также пределов кратковременной  $\sigma_B^t$  и длительной  $\sigma_{100}^t$  прочности (группа б), которые определялись по полученным математическим регрессионным моделям, были достаточно близки к экспериментальным данным (табл. 13, 14) [24].

Таким образом, в разработанной экспрессной методике КРАМ реализован новый концептуальный подход, включающий в алгоритм наряду с традиционными методами ряд полученных математических РМ, позволяющих достоверно

**Таблица 11. Математические модели для расчета предела кратковременной прочности  $\sigma_B^t$  по количеству упрочняющей фазы  $V_{\gamma'}^t$  литейных ЖНС**

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

**Таблица 12. Математические модели для расчета 100- и 1000-часовой длительной прочности  $\sigma_{100}^t$  и  $\sigma_{1000}^t$  по количеству фазы  $V_{\gamma'}^t$  в литейных ЖНС**

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

проводить прогнозирующие расчеты важнейших параметров, определяющих работоспособность

**Таблица 13. Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений предела кратковременной прочности  $\sigma_B^t$  для сплава ЗМИ-3У**

Значения параметров	Количество $\gamma'$ -фазы $V_{\gamma'}^t$ , мас. %					$\sigma_B^t$ , МПа			
	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$V_{\gamma'}^{20}$	$V_{\gamma'}^{800}$	$V_{\gamma'}^{900}$	$V_{\gamma'}^{1000}$	$\sigma_B^{20}$	$\sigma_B^{800}$	$\sigma_B^{900}$	$\sigma_B^{1000}$
Расчетные по РМ	8,2	50,9	48,4	44,4	34,4	918,6	901,6	723,1	473,4
Экспериментальные	8,2	44...52	-	-	-	920	900	-	-

**Таблица 14. Сравнительные данные расчетных и экспериментальных значений пределов  $\sigma_{100}^t$  и  $\sigma_{1000}^t$  длительной прочности для сплава ЗМИ-3У**

Значения параметров	Количество $\gamma'$ -фазы $V_{\gamma'}^t$ , мас. %				$\sigma_{100}^t$ , МПа					
	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$V_{\gamma'}^{800}$	$V_{\gamma'}^{900}$	$V_{\gamma'}^{1000}$	$\sigma_{100}^{800}$	$\sigma_{1000}^{800}$	$\sigma_{100}^{900}$	$\sigma_{1000}^{900}$	$\sigma_{100}^{1000}$	$\sigma_{1000}^{1000}$
Расчетные по РМ	8,2	48,38	44,37	34,36	509,9	376,5	320,2	193,9	139,4	42,6
Экспериментальные	8,2	-	-	-	491	392	300	199	-	-

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 параметров структурной стабильности (группа 1) для литейных ЖНС показал, что полученные математические РМ можно с высокой степенью достоверности применять для прогнозирующих расчетов критериев  $\bar{N}_{\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$  взамен традиционных методов PHACOMP и New PHACOMP. Показана возможность применения  $\Delta E$ -метода для расчета параметра  $\bar{M}d_{\gamma}$ .

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 методом CALPHAD.

3. Сравнительный анализ экспериментальных данных показал, что полученные группы математических РМ можно применять с высокой степенью достоверности для прогнозирующих расчетов температурных, коррозионных и прочностных параметров (группы 4, 5 и 6) при проектировании литейных ЖНС.

4. Показан новый концептуальный подход к многокритериальной оптимизации составов при проектировании литейных ЖНС с необходимым 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 ред. Е. Н. Каблова. — М.: Наука, 2006. — 272 с.
2. Каблов Е. Н. 75 лет. Авиационные материалы. Избранные труды ВИАМ 1932–2007 / Юбилейный науч.-техн. сб. под ред. Е. Н. Каблова. — М.: ВИАМ, 2007. — 439 с.
3. Шалин Р. Е. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Шалин Р. Е. и др. — М.: Машиностроение, 1997. — 336 с.
4. Phase calculation and its use in alloy design program for nickel-base superalloys / H. Harada et al. // Superalloys: A publ. of the Met. Soc. of AIME (USA). Champion (Pennsylvania) TMS. — 1988. — P. 733–742.
5. Симс Ч. Т., Столофф Н. С., Хагель У. К. Суперсплавы II. Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок; пер. с англ.: в 2-х кн.: под ред. Р. Е. Шалина. — М.: Металлургия, 1995. — 384 с.

6. Логунов А. В., Шмотин Ю. Н., Данилов Д. В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе. Часть II // Технология металлов. — 2014. — № 6. — С. 3–10.
7. Логунов А. В., Шмотин Ю. Н., Данилов Д. В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе. Часть III // Там же. — 2014. — № 7. — С. 3–11.
8. Логунов А. В., Шмотин Ю. Н., Данилов Д. В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе. Часть I // Там же. — 2014. — № 5. — С. 3–9.
9. Жаропрочные сплавы для газовых турбин. Материалы международной конференции / Д. Котсорадис 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 и др. — Запорож. машиностр. ин-т, 1990. — 56 с. — (Препринт / КИЕВ УМК ВО; ЗМИ 1990).
11. Никитин В. И. Коррозия и защита лопаток газовых турбин. — Л.: Машиностроение, 1987. — 272 с.
12. Никитин В. И., Ревзюк М. Б., Комисарова И. П. Влияние состава никелевых сплавов на их коррозионную стойкость в золе газотурбинного топлива // Труды ЦКТИ им. И. И. Ползунова. — 1978. — Вып. 158. — С. 71–74.
13. New PHACOMP and its application to alloy design / M. Morinaga et al. // Superalloys 1984, AIME, 1984. — P. 523–532.
14. Морозова Г. И. Компенсация дисбаланса легирования жаропрочных никелевых сплавов // Металловедение и термическая обработка металлов. — 2012. — № 12. — С. 52–56.
15. Морозова, Г. И. Сбалансированное легирование жаропрочных никелевых сплавов // Металлы. — 1993. — № 1. — С. 38–41.
16. Saunders N., Fahrman M., Small C. J. The application of CALPHAD calculations to Ni-based superalloys // Superalloys 2000. — TMS. — Warrendale. — 2000. — P. 803.
17. Caron P. High  $\gamma'$ -solvus new generation nickel-based superalloys for single crystal turbine blade applications // Superalloys 2000. A Publ. of the TMS. Seven Springs Mountain Resort in Champion, Pennsylvania // Minerals, Metals & Materials Society. — 2000. — P. 737–746.
18. Жуков А. А., Смирнова О. А. Оценка температуры полного растворения  $\gamma'$ -фазы жаропрочных никелевых сплавов на основе анализа двойных диаграмм состояния // Заготовительные производства в машиностроении. — 2004. — № 11. — С. 44–47.
19. Жуков А. А., Смирнова О. А. Оценка эксплуатационной пригодности жаропрочных сплавов для ГТД и ГТУ // Авиационно-космическая техника и технология. — 2005. — № 10. — С. 60–66.
20. Гайдук С. В., Кононов В. В., Куренкова В. В. Получение прогнозирующих математических моделей для расчета термодинамических параметров литейных жаропрочных никелевых сплавов // Современная электрометаллургия. — 2015. — № 4. — С. 31–37.
21. Гайдук С. В., Тихомирова Т. В. Применение CALPHAD-метода для расчета количества  $\gamma'$ -фазы и прогнозирования длительной прочности литейных жаропрочных никеле-

- вых сплавов // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. — 2015. — № 6. — С. 64–68.
22. *Гайдук С. В., Кононов В. В., Куренкова В. В.* Регрессионные модели для прогнозирования коррозионных параметров литейных жаропрочных никелевых сплавов // *Современная электрометаллургия*. — 2016. — № 3. — С. 51–56.
  23. *Гайдук С. В., Тихомирова Т. В.* Применение аналитических методов для расчета химического состава  $\gamma$ -,  $\gamma'$ -фаз и параметров фазовой стабильности литейных жаропрочных никелевых сплавов // *Авиационно-космическая техника и технология*. — 2015. — № 9. — С. 33–37.
  24. *Паспорт на жаропрочный коррозионностойкий никелевый сплав ЗМИ-3У (ХН64ВМКЮТ) / А. Д. Коваль и др.* — Запорожье, 1995. — 30 с.
  25. *Вертоградский В. А., Рыкова Т. П.* Исследование фазовых превращений в сплавах типа ЖС методом ДТА // *Жаропрочные и жаростойкие стали и сплавы на никелевой основе*. — М.: Наука, 1984. — С. 223–227.
- References**
1. *Kablov Ye. N.* Liteynye zharoprochnye splavy. Effekt S. T. Kishkina: nauch.-tekhn. sb.: k 100-letiyu so dnya rozhdeniya S. T. Kishkina; pod red. Ye. N. Kablova. — М.: Nauka, 2006. — 272 s.
  2. *Kablov Ye. N.* 75 let. Aviatzionnye materialy. Izbrannye trudy VIAM 1932–2007 / Yubileyny nauch.-tekhn. sb. pod red. Ye. N. Kablova. — М.: VIAM, 2007. — 439 s.
  3. *Shalin R. Ye.* Monokristally nikelovykh zharoprochnykh spлавov / Shalin R. Ye. i dr. — М.: Mashinostroyeniye, 1997. — 336 s.
  4. *Phase calculation and its use in alloy design program for nickel-base superalloys / H. Harada et al.* // *Superalloys: A publ. of the Met. Soc. of AIME (USA). Champion (Pennsylvania) TMS*. — 1988. — P. 733–742.
  5. *Sims Ch. T., Stoloff N. S., Khagel U. K.* Supersplavy II. Zharoprochnye materialy dlya aerokosmicheskikh i promyshlennykh energostanovok; per. s angl.: v 2-kh kn.: pod red. R. Ye. Shalina. — М.: Metallurgiya, 1995. — 384 s.
  6. *Logunov A. V., Shmotin Yu. N., Danilov D. V.* Metodologicheskiye osnovy avtomatizirovannogo proyektirovaniya zharoprochnykh spлавov na nikelovoy osnove. Chast II // *Tekhnologiya metallov*. — 2014. — № 6. — S. 3–10.
  7. *Logunov A. V., Shmotin Yu. N., Danilov D. V.* Metodologicheskiye osnovy avtomatizirovannogo proyektirovaniya zharoprochnykh spлавov na nikelovoy osnove. Chast III // *Tekhnologiya metallov*. — 2014. — № 7. — S. 3–11.
  8. *Logunov A. V., Shmotin Yu. N., Danilov D. V.* Metodologicheskiye osnovy avtomatizirovannogo proyektirovaniya zharoprochnykh spлавov na nikelovoy osnove. Chast I // *Tekhnologiya metallov*. — 2014. — № 5. — S. 3–9.
  9. *Zharoprochnye splavy dlya gazovykh turbin. Materialy mezhdunarodnoy konferentsii / D. Kotsoradis i dr.; per. s angl. pod red. R. Ye. Shalina.* — М.: Metallurgiya, 1981. — 480 s.
  10. *Nauchnye osnovy legirovaniya zharoprochnykh nikelovykh spлавov, stoykikh protiv vysokotemperaturnoy korrozii (VTK) / A. D. Koval i dr.* — Zaporozh. mashinostr. in-t, 1990. — 56 s. — (Preprint / KIEV UMK VO; ZMI 1990).
  11. *Nikitin V. I.* Korroziya i zashchita lopatok gazovykh turbin. — L.: Mashinostroyeniye, 1987. — 272 s.
  12. *Nikitin V. I., Revzyuk M. B., Komisarova I. P.* Vliyaniye sostava nikelovykh spлавov na ikh korrozionnyuyu stoykost v zole gazoturbinnogo topliva // *Trudy TsKTI im. I. I. Polzunova*. — 1978. — Vyp. 158. — S. 71–74.
  13. *New PHACOMP and its application to alloy design / M. Morinaga et al.* // *Superalloys 1984, AIME, 1984*. — P. 523–532.
  14. *Morozova G. I.* Kompensatsiya disbalansa legirovaniya zharoprochnykh nikelovykh spлавov // *Metallovedeniye i termicheskaya obrabotka metallov*. — 2012. — № 12. — S. 52–56.
  15. *Morozova G. I.* Sbalansirovannoye legirovaniye zharoprochnykh nikelovykh spлавov // *Metally*. — 1993. — № 1. — S. 38–41.
  16. *Saunders N., Fahrman M., Small C. J.* The Application of CALPHAD calculations to Ni-based superalloys // *Superalloys 2000*. — TMS. — Warrendale. — 2000. — P. 803.
  17. *Caron P.* High  $\gamma'$ -solvus new generation nickel-based superalloys for single crystal turbine blade applications // *Superalloys 2000. A Publ. of the TMS. Seven Springs Mountain Resort in Champion, Pennsylvania // Minerals, Metals & Materials Society*. — 2000. — P. 737–746.
  18. *Zhukov A. A., Smirnova O. A.* Otsenka temperatury polnogo rastvoreniya  $\gamma'$ -fazy zharoprochnykh nikelovykh spлавov na osnove analiza dvoynykh diagramm sostoyaniya // *Zagotovitelnye proizvodstva v mashinostroyenii*. — 2004. — № 11. — S. 44–47.
  19. *Zhukov A. A., Smirnova O. A.* Otsenka ekspluatatsionnoy prigodnosti zharoprochnykh spлавov dlya GTD i GTU // *Aviatsionno-kosmicheskaya tekhnika i tekhnologiya*. — 2005. — № 10. — S. 60–66.
  20. *Gayduk S. V., Kononov V. V., Kurenkova V. V.* Polucheniye prognoziryushchikh matematicheskikh modeley dlya rascheta termodinamicheskikh parametrov liteynykh zharoprochnykh nikelovykh spлавov // *Sovremennaya elektrometallurgiya*. — 2015. — № 4. — S. 31–37.
  21. *Gayduk S. V., Tikhomirova T. V.* Primeneniye CALPHAD-metoda dlya rascheta kolichestva  $\gamma'$ -fazy i prognozirovaniya dlitelnoy prochnosti liteynykh zharoprochnykh nikelovykh spлавov // *Metallurgicheskaya i gornorudnaya promyshlennost*. — 2015. — № 6. — S. 64–68.
  22. *Gayduk S. V., Kononov V. V., Kurenkova V. V.* Regressiionnye modeli dlya prognozirovaniya korrozionnykh parametrov liteynykh zharoprochnykh nikelovykh spлавov // *Sovremennaya elektrometallurgiya*. — 2016. — № 3. — S. 51–56.
  23. *Gayduk S. V., Tikhomirova T. V.* Primeneniye analiticheskikh metodov dlya rascheta khimicheskogo sostava  $\gamma$ -,  $\gamma'$ -faz i parametrov fazovoy stabilnosti liteynykh zharoprochnykh nikelovykh spлавov // *Aviatsionno-kosmicheskaya tekhnika i tekhnologiya*. — 2015. — № 9. — S. 33–37.
  24. *Pasport na zharoprochny korrozionnostoyky nikelovy spлав ZMI-3U (KhN64VMKYuT) / A. D. Koval i dr.* — Zaporozhye, 1995. — 30 s.
  25. *Vertogradsky V. A., Rykova T. P.* Issledovaniye fazovykh prevrashcheny v splavakh tipa ZhS metodom DTA // *Zharoprochnye i zharostoykiye stali i splavy na nikelovoy osnove*. — М.: Nauka, 1984. — S. 223–227.

ЗАСТОСУВАННЯ КОМПЛЕКСНОЇ РОЗРАХУНКОВО-АНАЛІТИЧНОЇ МЕТОДИКИ  
ДЛЯ БАГАТОКРИТЕРІЙНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ СКЛАДІВ ЛИВАРНИХ ЖАРОМІЦНИХ НІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ

С. В. Гайдук<sup>1</sup>, В. В. Кононов<sup>1</sup>, В. В. Куренкова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Запорізький національний технічний університет.

690063, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 64. E-mail:rector@zntu.edu.ua

<sup>2</sup>ТОВ «Патон Турбайн Текнолоджіс».

03028, м. Київ, вул. Ракетна, 26. E-mail: vkurenkova@patontt.com

Розроблена комплексна розрахунково-аналітична методика, що включає в алгоритм як традиційні методики, так і отримані регресійні моделі для прогнозуючих розрахунків важливіших параметрів, що визначають працездатність ливарних жароміцних нікелевих сплавів. Методика дозволяє без проведення проміжних експериментів шляхом багатокритерійної оптимізації складу проектувати нові композиції і модернізувати склади відомих промислових сплавів з необхідним рівнем службових характеристик. Бібліогр. 25, табл. 14, іл. 1.

**Ключові слова:** жароміцні нікелеві сплави; система легування; критерії (параметри) працездатності; багатокритерійна оптимізація; регресійне рівняння; регресійна модель; комплексна розрахунково-аналітична методика

APPLICATION OF INTEGRATED CALCULATION-ANALYTIC METHOD FOR MULTI-CRITERION  
OPTIMIZING OF COMPOSITIONS OF CASTING HEAT-RESISTANT NICKEL ALLOYS

S.V. Gaiduk<sup>1</sup>, V.V. Kononov<sup>1</sup>, V.V. Kurenkova<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Zaporozhye National Technical University.

64 Zhukovsky Str., 690063, Zaporozhye, Ukraine. E-mail:rector@zntu.edu.ua

<sup>2</sup>Company «Paton Turbine Technologies».

26 Paketnaya Str., 03028, Kiev, Ukraine. E-mail: vkurenkova@patontt.com

An integrated calculation-analytical method was developed, which includes both the traditional methods, and also obtained regression models in the algorithm for forecasting calculation of parameters determining the serviceability of casting heat-resistant alloys. The method allows designing the new compositions and modifying the compositions of known industrial alloys with a required level of service characteristics by the multi-criterial optimizing of composition without carrying out the intermediate experiments. Ref. 25, Tables 14, Figure 1.

**Key words:** heat-resistant nickel alloys; alloying system; criteria (parameters) of serviceability; multi-criterial optimization; regression equation; regression model; integrated calculation-analytic method

Поступила 30.11.2016

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОЗВАРЮВАННЯ ім. Є. О. ПАТОНА НАНУ  
МІЖНАРОДНА АСОЦІАЦІЯ «ЗВАРЮВАННЯ»



**Міжнародна конференція  
ЗВАРЮВАННЯ ТА СПОРІДНЕНІ ТЕХНОЛОГІЇ – СЬОГОДЕННЯ І МАЙБУТНЄ**

Присвячується 100-річчю  
Національної академії наук України

5 – 6 грудня, 2018 р.  
Україна, м. Київ

Голова:  
академік НАН України Л. Лобанов

**НАУКОВІ НАПРЯМКИ КОНФЕРЕНЦІЇ**

- Технології, матеріали і обладнання для зварювання і споріднених процесів
- Міцність зварних конструкцій, теоретичні та експериментальні дослідження напружено-деформуючих станів та їх регулювання
- Вдосконалення зварних конструкцій, автоматизація їх розрахунку і проектування, оцінка і подовження ресурсу
- Нові конструкційні матеріали
- Неруйнівний контроль і технічна діагностика
- Інженерія поверхні
- Зварювання в медицині – технології, обладнання; наноматеріали і нанотехнології
- Проблеми екології зварювального виробництва
- Спеціальна електрометалургія
- Стандартизація, сертифікація продукції зварювального виробництва, підготовка і атестація спеціалістів

Відправлення тез доповідей для участі в роботі конференції – до 01.11.2017 р.

ІЕЗ ім. Є. О. Патона НАН України,  
вул. Казимира Малевича (Боженка), 11, м. Київ, 03680  
тел.: (38044) 200-60-16; 200-47-57; факс: (38044) 528-04-86  
E-mail: office@paton.kiev.ua  
www.paton.kiev.ua | www.patonpublishinghouse.com