

КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ КАК МЕТОД ГЕНЕРАЦИИ МОДЕЛЕЙ В МЕТАЛЛОВЕДЕНИИ

Канд. техн. наук, доц. ПАНИЧ Гер. Г., канд. техн. наук ГАЛЫНСКАЯ Н. А., инж. ПАНИЧ Г. Г.,
канд. техн. наук, доц. МЕЛЬНИЧЕНКО В. В.

Белорусский национальный технический университет,
РУП «МАЗ»

Современная наука о металлах характеризуется наличием весьма значительных объемов экспериментального материала, описывающего связи типа «химические составы сплавов – технологические параметры термической (химико-термической) обработки – свойства сплавов» [1]. В то же время быстрое получение информации, интересующей технолога-термиста в работе с конкретным сплавом, весьма затруднено вследствие как большого объема информации, так и ее неполной систематизации. Это неизбежно при использовании традиционного «бумажного» принципа хранения информации, когда преобразовать (обновить) информацию почти невозможно. Не дает большого эффекта и чисто механическое кодирование – перенос информации на машинные носители. Создаваемые таким образом «базы» или «банки» данных не соответствуют этому названию: поиск информации в них не менее трудоемок (и более дорог), чем в обычной библиотеке.

Эффективным методом почти мгновенного получения точной информации для конкретных условий производства и технологии является создание (генерация) математических моделей определенных металлургических систем «состав – технология – свойство». Как известно [2], в зависимости от уровня (глубины, подробности) проникновения исследователя в природу протекающих в системе процессов их модели в первом приближении могут быть подразделены на макромоделли (типа «черный ящик») и микромоделли. Хороший пример математической микромоделли [3] – метод расчета S -диаграмм по термодинамическим данным. Программная реализация метода (разработанная авторами программа CDIAGRAM) показала, что при всей глубине теоретической проработки модель позволяет с небольшой (практически неудовлетворительной) точностью рассчитывать S -диаграммы только для углеродистых сталей; «раздвоение» S -кривой карбидообразователями уже не моделируется.

В отличие от микромоделлей, до настоящего времени носящих в металлвоведении в основном концептуальный, словесно-графический характер [4], математические макромоделли, не

описывая механизма протекающих в сплаве весьма сложных явлений, позволяют быстро и с высокой точностью рассчитать интересующее технолога свойство сплава по его составу и параметрам термообработки или решить более важную обратную задачу: определить параметры обработки для получения заданных значений свойств при заданном составе.

В качестве оптимального метода создания точных макромоделлей физико-химических систем авторами выбран метод множественной корреляции [5], имеющий высокую мощность, эффективность, но до настоящего времени крайне ограниченно реализованный программно [6].

Авторами разработан и в течение ряда лет применяется на практике пакет прикладных программ (ППП) Stat, содержащий все необходимые программные средства для решения задач макромоделлирования химико-металлургических многокомпонентных систем. Необходимость самостоятельной разработки программного обеспечения (ПО) для решения статистических задач металлвоведения вызвана тем, что общеизвестное ПО (например, электронные таблицы Excel [6]) обладает набором средств статистической обработки данных, хотя и обширным, но составленным в значительной мере по произволу разработчиков (стремившихся, по-видимому, «охватить все возможное») и не содержащим необходимых для данного случая методов. Описываемое ниже ПО содержит средства, позволяющие решать практически все задачи моделирования, возникающие в процессе работы металловеда; в то же время программы весьма компактны и не «привязаны» к определенному типу ЭВМ или программных оболочек типа Windows.

Как известно [5, 7], корреляционный анализ в целом предназначен для анализа следующего класса ситуаций. Состояние некоторой системы (объекта) описывается выходным параметром (параметром оптимизации) Y , на величину которого пользователь воздействует, изменяя входные (управляющие) параметры X . Модель представляет математическое соотношение, описывающее зависимость $Y = F(X)$. Корреляция может быть однофакторной или множе-

ственной; в последнем случае количество входов X более одного.

Разработанное авторами ПО для анализа однофакторной корреляции решает задачу моделирования по следующему алгоритму [7].

1. Дисперсионный анализ (программа *Distrib*) отвечает на вопрос: не зависит ли выходной параметр Y , кроме входной величины X , от других неслучайных воздействий; иначе говоря, допустим ли в данном случае однофакторный корреляционный анализ или необходим анализ многофакторной корреляции.

2. Собственно корреляционный анализ отвечает на вопрос: существует ли тесная (статистически значимая, функциональная) зависимость величины Y от величины X . Анализ может быть произведен методом расчета корреляционного отношения (программа *Correlat*) или более строго – методом ранговой корреляции [8] (программа *Ranger*) с предварительным отсеком результатов-промахов (программа *Blunder*). Ранговая корреляция имеет также то преимущество, что для каждого уровня величины X требуется реализация не нескольких, а только одного опыта.

3. Регрессионный анализ позволяет рассчитать коэффициенты регрессии однофакторной модели либо для одного из 16 распространенных видов регрессии [8] (программа *Regres*), либо методом полиномиальной регрессии с автоматическим определением степени полинома (программа *PNR*). В случае, если искомая модель-функция заведомо не монотонна (в пределах интервала варьирования X знак производной неоднократно меняется, что для металловедения скорее правило, чем исключение), моделирование производится методом сплайн-аппроксимации (программа *Splain*) с получением функции, график которой проходит через все опытные точки.

Упомянутые программы могут быть использованы без существенных временных затрат благодаря связи, обеспечиваемой созданием общей базы исходных данных, подвергаемых многократной обработке, т. е. «пропуску» через ряд программ последовательно.

Описанное ПО не несет принципиальной новизны; его преимуществами являются, прежде всего, компактность, простота и быстрота применения. В отличие от него метод множественной корреляции пока не нашел в металловедении широкого применения вследствие сложности и громоздкости алгоритма и соответственно отсутствия хорошо разработанного ПО. Между тем зависимость свойств сплава (покрытия) от влияния одновременно множества факторов – для металловедения не исключение, а правило. На практике чаще всего возникают две ситуации.

1. Необходимо разработать элементный и количественный состав (часто не только состав, но одновременно и структуру) сплава или покрытия, гарантирующий получение оптимальных свойств. Наиболее быстрый способ решения задачи – математическое планирование эксперимента с последующей оптимизацией [9]. Авторами разработано ПО, позволяющее реализовать этот путь как методом реплик (Бокса–Уилсона) – если между входными параметрами $X[1]...X[n]$ корреляция отсутствует (программа *Box22*), так и методом планирования или оптимизации на симплексе – если упомянутая корреляция заведомо существует (программы *Simplex3*, *Optisimp*). Упомянутые программные средства многие годы успешно применяются при разработке и исследовании новых технологий лазерной химико-термической обработки в отраслевой НИЛ «Плазменная металллизация» БНТУ с последующим внедрением разработок в производство, в частности на Мозырском нефтеперерабатывающем заводе.

2. Состав сплава задан (например, наличием стали определенной марки); необходимо определить параметры технологического процесса термической (химико-термической) обработки для гарантированного получения заданного свойства. Таким образом, имеется математическое соотношение типа

$$Y = F(LЭ[1], \dots, LЭ[n], ТП[1], \dots, ТП[m]),$$

где Y – численное значение рабочего свойства (например, твердости); $LЭ$ – концентрации легирующих элементов в сплаве; $ТП$ – численные значения технологических параметров. Уравнение необходимо получить на основе опытных данных (собственных или литературных [1]), а затем решить относительно неизвестных $ТП$ при заданном значении Y .

Примером подобного алгоритма является [10]. На ее основе авторами разработаны программы *Asher1* и *Zakal*, позволяющие рассчитывать параметры процессов закалки и отпуска конструкционных сталей заданного состава для получения заданных распределений твердости по сечению деталей. Программы нашли практическое применение в ЦЗЛ Минского автозавода. Однако они потребовали использования уже имеющегося алгоритма [10], что в большинстве случаев невозможно. Поэтому необходимо было создать оригинальную программу расчета моделей множественной корреляции *Multicor* по алгоритму, описанному в [5]. Программа рассчитывает модель зависимости выходного параметра Y от нескольких (2...20) входных параметров $X[i]$ для трех наиболее часто встречающихся типов корреляции: линейного, показательного (величины $X[i]$ служат показателями при возведении

в степени коэффициентов регрессии модели) и степенного (величины $X[i]$ возводятся в степени, равные коэффициентам регрессии) по данным множества (до 50) опытов. Основным ограничением применимости программы является монотонность получаемой функции. Это может дать не вполне точную, хотя и адекватную модель в случае, когда в интервале варьирования одного из входных параметров на изменения выходной величины поочередно влияют несколько механизмов; пример – процессы отпуска сталей при переходе от низкого отпуска к высокому. В этом случае интервал варьирования соответствующего входа необходимо разделить на несколько субинтервалов; например, модели низкого, среднего и высокого отпуска рассчитываются по трем отдельным моделям, которые затем «стыкуются».

Программа Multicor многократно использована на кафедре «Материаловедение в машиностроении» БНТУ при создании ППП Alloy3, предназначенного как для обучения студентов спецкурсу «Математическое моделирование технологических процессов», так и для технологических целей. В частности, по программе Multicor рассчитаны модели, положенные в основу следующих программ:

Critpoin (критические точки) – расчет температур критических точек конструкционных и инструментальных сталей в зависимости от состава с точностью $\pm 3^\circ$;

Legmar (легирование – мартенсит) – расчет температур начала и конца мартенситного превращения и количества остаточного аустенита в зависимости от природы закалочной среды и состава стали с точностью $\pm 3^\circ$;

Temper (отпуск) – расчет влияния технологии отпуска на твердость углеродистых сталей с точностью ± 1 HRC;

Hudremon (по имени Э. Гудремона) – расчет критических диаметров прокаливаемости углеродистых и легированных сталей в различных охлаждающих средах по составу стали с точностью ± 3 мм;

Velocrit (критическая скорость) – расчет критических скоростей закалки сталей в различных средах в зависимости от состава стали; программа позволяет обойтись при определении режима закалки без C-диаграмм;

Wldabltу (свариваемость) – расчет балла свариваемости сталей по 4-балльной шкале [1] в зависимости от их состава;

Eitprops (восемь свойств) – расчет основных прочностных, пластических и упругих свойств стали в равновесном состоянии с точностью ± 3 % по составу стали;

Ninprops (девять свойств) – расчет основных механических свойств материалов сварных швов и наплавленных покрытий;

Carbon (цементация) – расчет параметров процесса газовой цементации стали для получения заданного распределения углерода в цементованном слое с точностью $\pm 0,1$ % C по массе;

Asher1, Zakal – расчет свойств стали после термической обработки в зависимости от состава стали и параметров технологического процесса.

Программа Multicor сконструирована таким образом, чтобы имелась возможность использовать ее как автономно, так и для создания пользовательских программ с широкими функциями. Предназначенные для мультикорреляционного анализа опытные данные после ввода с клавиатуры записываются на машинный носитель в специальные файлы, а затем могут быть считаны и использованы либо непосредственно (для расчета выходного значения при данном сочетании входных), либо в качестве модели-алгоритма для создания других программ. Таким образом, программа Multicor предназначена прежде всего для генерации моделей, а специализированные программы – для использования полученных моделей при решении конкретных практических задач. В частности, программы Critpoin, Hudremon, Asher1, Zakal использованы как модули программного комплекса Termist, предназначенного для расчета технологического процесса термической обработки конструкционных сталей заданного состава [11].

ЛИТЕРАТУРА

1. Сорокин В. Г., Волосникова А. В., Вяткин С. А. Марочник сталей и сплавов. – М.: Машиностроение, 1989. – 640 с.
2. Норенков И. Л. Системы автоматизированного проектирования: Учеб. пособие: В 9 т. – Мн.: Вышэйш. шк., 1987. – Т. 4. – С. 43.
3. Александров Л. Н., Любов Б. Я. Теоретический анализ влияния легирования на кинетику изотермического распада аустенита // Проблемы металловедения и физики металлов. – М.: Металлургиздат, 1958. – Вып. 5. – 603 с.
4. Штремель М. А. Прочность сплавов. – М.: МИСиС, 1999. – Ч. 1. – 383 с.
5. Статистические методы обработки эмпирических данных: Рекомендации. – М., 1978. – 232 с.
6. Зайден М. EXCEL 2000. – М., 1999. – 328 с.
7. Виноградов Ю. С. Математическая статистика и ее применение в текстильной и швейной промышленности. – М.: Легкая индустрия, 1970. – 128 с.
8. Дьяконов В. П. Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик для ПЭВМ. – М.: Наука, 1989. – 239 с.
9. Новик Ф. С. Математические методы планирования эксперимента в металловедении. – М.: МИСиС, 1973. – Разд. 1. – 107 с.
10. Just E. Formeln der Haertbarkeit // Haerterei-Technische Mitteilungen. – 1968. – Vol. 23, № 2. – S. 85–100.
11. Панич Гер. Г., Панич Г. Г. Разработка программной системы для расчета технологии термической обработки сталей // Передовые технологии в производстве материалов: Тез. докл. 2-й междунар. конф. – Мн., 1997. – С. 37–40.