

Табл. 3. Значения t -критерия

Контролируемый параметр	Номер опыта	t расч	t табл
Толщина слоя с ШГ, мм	7	3,10	
	8	3,28	3,31
	9	3,25	
Степень сфероидизации графита, %	7	1,41	
	8	1,17	3,31
	9	2,03	

Полученные модели (рис. 1, б, в, д) показывают, что максимальные толщина слоя с ШГ и степень его сфероидизации наблюдаются при использовании модифицирующих покрытий, содержащих 39–42,5 % MgF_2 , 42–45,5 % $CaSi_2$, 12–15,5 % С.

Учитывая, что в состав покрытия входят также связующее, огнеупорный наполнитель и другие компоненты, составляющие в среднем 15–25 %, основные компоненты необходимо вводить в следующем соотношении 31,5–34 % MgF_2 , 33,5–36,5 % $CaSi_2$ и 9,5–12,5 % С.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н о в и к Ф.С. Планирование эксперимента на симплексе при изучении металлических систем. — М., 1985. — 236 с.

УДК 621.746.6

В.Ф.СОБОЛЕВ, А.Н.ЧИЧКО,
Ф.Н.БОРОВИК

О ПАРАМЕТРАХ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ТИП МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ В СПЛАВАХ

Исследование межатомного взаимодействия компонентов в сплавах и его влияния на механические и литейные их свойства является одной из важнейших задач теории литейных процессов. Образование различных фаз, жидких и твердых растворов непосредственно связано с процессами межатомного взаимодействия. Выяснение основных факторов, определяющих характер взаимодействия компонентов, создаст дополнительные возможности для повышения информативности математических моделей, используемых при прогнозе свойств сплава.

Цель настоящей работы – изучение путей математического моделирования межатомного взаимодействия компонентов в двойных сплавах с помощью характеристик электронного энергетического спектра их компонентов.

В качестве характеристик электронного энергетического спектра использовали следующие параметры: 1, 2, 3-й коэффициенты, характеризующие скорость изменения энергии электронов в зависимости от волнового вектора K для s , d_0 , d_1 , d_2 -подполос; значения s - и d -полос при $K = 0$; ширину s , d_0 , d_1 , d_2 -подполос; энергию Ферми; степень заполнения s , d_0 , d_1 , d_2 подполос, вычисленную в приближении Хартри [1].

Для оценки математического моделирования межатомного взаимодействия компонентов сплава с помощью характеристик энергетического спектра использовали метод случайного поиска с адаптацией [2, 3]. Суть его сводится к тому, что для заданной обучающей матрицы осуществляется выбор эффективной подсистемы признаков, позволяющей с определенной степенью точности проводить анализ межатомного взаимодействия компонентов сплава. Реализация этого метода состояла из следующих этапов: 1) ввод начальной матрицы; 2) определение априорных вероятностей выбора признаков P_i ; 3) случайный выбор r -подпространств и проверка контрольной матрицы; 4) определение оценочного функционала для каждого подпространства; 5) нахождение подпространств с минимальными значениями функционала P_1 ; 6) "поощрение" и "наказание" признаков изменением вероятности q_i ; 7) новый выбор r -подпространств и определение оценочного функционала.

В качестве оценочного функционала использовали соотношение

$$P_1 = \frac{\sum_{i=1}^k q_i \frac{b_i}{N_i}}{\sum_{i=1}^k b_i} ,$$

где q_i – априорная вероятность появления объекта i -го класса; b_i – число точек множества M_i , попавших в область y_i ; k – число классов; N_i – количество объектов в каждом классе.

На начальном этапе вероятности каждого признака полагались одинаковыми и равными

$$P_i = 1/n,$$

где n – число признаков.

Обучающая матрица формировалась на основе гипотезы о том, что межатомное взаимодействие компонентов сплава определяется различием вышеперечисленных характеристик энергетического спектра компонентов. Соотношение для определения признака двойного сплава представляет собой модификацию правила Юм-Розери:

$$\Delta F = \frac{F_1 - F_2}{F_1} , \quad (1)$$

где F_1 и F_2 – признаки, характеризующие 1-ю и 2-ю компоненты двойной системы.

Таким образом, на первом этапе исследования на основе диаграмм состояния [4] были отобраны три группы систем, характеризующихся различным межатомным взаимодействием компонентов. Для каждой из них по соотношению (1) были вычислены признаки двойных систем. Признаки, сформированные по заранее определенным группам (*A*, *B*, *C*), представляли обучающие матрицы. Вместе с характеристиками энергетического спектра электронов в обучающих матрицах использовали атомный радиус, потенциалы ионизации и электроотрицательность компонентов сплава. К первой группе *A* отнесли системы, элементы которых не взаимодействуют друг с другом ни в твердом, ни в жидком состоянии. Сюда были включены системы, в которых наблюдается расслаивание чистых элементов в жидком состоянии, а также ряд систем с практически не изученными кривыми равновесия. Причем последние были включены для того, чтобы увеличить представительность класса (группы), так как количество изученных расслаивающихся систем незначительно. Ко второй группе *B* отнесли системы, компоненты которых образуют непрерывный ряд твердых растворов. Системы этой группы являются в большинстве случаев хорошо изученными и представляют самую достоверную часть используемого экспериментального материала. Третья группа *C* включала системы, компоненты которых проявляют химическое взаимодействие посредством образования интерметаллидов или химических соединений. В эту группу вошли системы, компоненты которых образуют незначительную область растворимости в твердом состоянии.

Исследование проводилось на шести обучающих матрицах. В первой выборке (*M1*) содержалась информация о компонентах 81 системы. Все системы этой матрицы разделялись на три группы по 27 систем в каждой. Во второй выборке (*M2*) содержалось 54 системы (27 систем группы *A* и 27 группы *B*). В третью выборку (*M3*) входило 67 систем (23 системы группы *A*, 23 группы *B* и 21 группы *C*), в четвертую — 46 систем (23 системы группы *A* и 23 группы *B*). В пятой (*M5*) и шестой (*M6*) обучающих выборках содержалось столько же систем, сколько их было в третьей и четвертой выборках соответственно. Обучающие матрицы *M4*, *M3* отличались от *M5*, *M6* некоторыми системами.

Решение задачи условно можно разделить на два этапа. На первом этапе определялись правила классификации групп сплавов по наиболее информативной совокупности признаков (процесс обучения). На втором этапе ЭВМ осуществлялась классификация экзаменационной выборки, которая совпала с обучающей (экзамен). Таким образом, выбиралась такая система признаков-функций, для которой экзамен проводился при наименьшем количестве "ошибок".

Результаты проведенных исследований показали, что ни одна из выбранных матриц не позволяет получать правильную классификацию рассмотренных систем. То есть среди изученных систем всегда были такие, которые классифицировались ЭВМ как принадлежащие не к своему классу. При расчетах получено, что число неправильных реализаций минимальное при определенном количестве признаков. Так, было установлено, что при экзамене матрицы *M1* число неправильно опознанных реализаций минимальное, когда выбранная совокупность содержит 5–8 признаков. Причем с увеличением числа при-

Табл. 1. Относительный вес признака после разделения матрицы на классы

Наименование параметра	Относительный вес признака*
Атомный радиус	0,09
Энергия Ферми	0,14
Ширина d_0 -подполосы	0,12
Первый потенциал ионизации	0,11
Ширина d_1 -подполосы	0,15
Заполнение d_2 -подполосы	0,08
Энергия d -полосы при $K = 0$	0,07
Коэффициенты, характеризующие энергию d_0 -подполосы	0,06
Второй потенциал ионизации	0,06
Энергия s -полосы при $K = 0$	0,05
Заполнение d_0 -подполосы	0,04
Коэффициенты, характеризующие изменение s - и d -полос, заполнение s, d_1, d_2 -полос	0,03

* Усредненный вес по шести матрицам, отнесенный к единице.

наков число неправильно распознанных реализаций растет, что наблюдается и с уменьшением числа признаков (меньше 5). Подобная тенденция наблюдается и для других обучающих матриц. Для матрицы $M2$ минимальное количество признаков, приводящих к минимуму неправильно распознанных реализаций, составляет 7, для $M3$ — 5–6 признаков, для $M4$ — 6–8, для $M5, M6$ — 6–8 признаков.

Как видно, имеется устойчивая тенденция к уменьшению числа неправильно распознанных реализаций при достижении 6–8 признаков.

Анализ результатов, приведенных в табл. 1, показал, что системы двойных сплавов по типу межатомного взаимодействия компонентов можно классифицировать, если использовать в качестве характеристик признаки, построенные на характеристиках энергетического спектра электронов компонентов. Причем наиболее эффективными характеристиками для оценки межатомного взаимодействия компонентов являются энергия Ферми, ширина подполос и атомный радиус. Это свидетельствует о возможности математического моделирования межатомного взаимодействия компонентов в сплавах на основе признаков, построенных на характеристиках энергетического спектра электронов с помощью соотношения (1).

ЛИТЕРАТУРА

1. Соболев В.Ф., Боровик Ф.Н., Чичко А.Н. Влияние электронной структуры компонентов сплава на образование интерметаллидов в алюминиевых сплавах // Вестн АН БССР. Сер. физ. -техн. наук. — 1985. — № 2. — С. 21–23. 2. Лбов Г.С. Методы обработки разнотипных экспериментальных данных. — Новосибирск, 1981. — 157 с. 3. Математическое обеспечение ЕС ЭВМ. — Мн., 1979. — Вып. 10. — 240 с. 4. Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. — М., 1962. — Т. 1. — 607 с.