

**А. А. ГЛОТКА**

**С. В. ГАЙДУК**

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ  
ПРОЕКТИРОВАНИЕ СВОЙСТВ  
ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ  
НА НИКЕЛЕВОЙ ОСНОВЕ**

*Монография*

Москва    Вологда  
«Инфра-Инженерия»  
2021

УДК 669.018.44  
ББК 34.35  
Г54

**Глотка, А. А.**

**Г54** Термодинамическое проектирование свойств литейных жаропрочных сплавов на никелевой основе : монография / А. А. Глотка, С. В. Гайдук]. – Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2021. – 264 с.: ил., табл.  
ISBN 978-5-9729-0536-2

Определены параметры структурной стабильности традиционными методами PHACOMP и New PHACOMP. Для литейных жаропрочных никелевых сплавов с различным типом легирования выполнены расчеты методом CALPHAD химических составов  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз, а также карбидов. На основе математической обработки данных получены универсальные регрессионные модели для прогнозирования параметров структурной стабильности и соотношения элементов в составе сплава.

Для инженерно-технических работников в области металловедения и термической обработки. Может быть полезно студентам, аспирантам и преподавателям металлургических специальностей.

УДК 669.018.44  
ББК 34.35

ISBN 978-5-9729-0536-2

© Глотка А. А., Гайдук С. В., 2021  
© Издательство «Инфра-Инженерия», 2021  
© Оформление. Издательство «Инфра-Инженерия», 2021

---

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ГЛАВА 1.</b> КОМПЛЕКСНАЯ РАСЧЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ МЕТОДИКА ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	5
<b>ГЛАВА 2.</b> ПРИМЕНЕНИЕ CALPHAD-МЕТОДА ДЛЯ РАСЧЕТА КОЛИЧЕСТВА $\gamma'$ -ФАЗЫ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ДЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЧНОСТИ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	32
<b>ГЛАВА 3.</b> ПОЛУЧЕНИЕ ПРОГНОЗИРУЮЩИХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	43
<b>ГЛАВА 4.</b> МАТЕМАТИЧЕСКИЕ РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ПРОГНОЗИРУЮЩИХ РАСЧЕТОВ КОРРОЗИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	55
<b>ГЛАВА 5.</b> ПРИМЕНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА $\gamma$ -, $\gamma'$ -ФАЗ И ПАРАМЕТРОВ ФАЗОВОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	67
<b>ГЛАВА 6.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ВЫДЕЛЕНИЯ ФАЗ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВАХ .....	79
<b>ГЛАВА 7.</b> ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	87
<b>ГЛАВА 8.</b> МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ КОРРОЗИИ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....	98
<b>ГЛАВА 9.</b> РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ В КАРБИДАХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ РАВНОСНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.....	110
<b>ГЛАВА 10.</b> СПЕЦИФИКА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ В КАРБИДАХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СИСТЕМ РАВНОСНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.....	125

---

<b>ГЛАВА 11. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ В СТРУКТУРЕ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ВО ВТОРИЧНЫХ КАРБИДАХ .....</b>	<b>141</b>
<b>ГЛАВА 12. МНОГОКРИТЕРИАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА ЖАРОПРОЧНОГО ЛИТЕЙНОГО КОРРОЗИОННОСТОЙКОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЛОПАТОК МЕТОДОМ НАПРАВЛЕННОЙ (МОНО) КРИСТАЛЛИЗАЦИИ .....</b>	<b>157</b>
<b>ГЛАВА 13. ТЕХНОЛОГИЧЕСКИ СВАРИВАЕМЫЙ ЛИТЕЙНЫЙ ЖАРОПРОЧНЫЙ КОРРОЗИОННОСТОЙКИЙ НИКЕЛЕВЫЙ СПЛАВ .....</b>	<b>172</b>
<b>ГЛАВА 14. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ПАССИВНОГО И АКТИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА К ОЦЕНКЕ ВЛИЯНИЯ ГАФНИЯ НА ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА .....</b>	<b>186</b>
<b>ГЛАВА 15. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГАФНИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ЛИТЕЙНОГО ЖАРОПРОЧНОГО КОРРОЗИОННОСТОЙКОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА ПАССИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА .....</b>	<b>195</b>
<b>ГЛАВА 16. ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ТАНТАЛА НА КРИТИЧЕСКИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В ЛИТЕЙНОМ СВАРИВАЕМОМ ЖАРОПРОЧНОМ НИКЕЛЕВОМ СПЛАВЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ РАСЧЕТНЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДИК .....</b>	<b>205</b>
<b>ГЛАВА 17. ПРИМЕНЕНИЕ CALPHAD-МЕТОДА К РАСЧЕТУ ФАЗОВОГО СОСТАВА ЛИТЕЙНОГО СВАРИВАЕМОГО ЖАРОПРОЧНОГО КОРРОЗИОННОСТОЙКОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА С ТАНТАЛОМ .....</b>	<b>215</b>
<b>ГЛАВА 18. СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СВАРИВАЕМОСТИ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ .....</b>	<b>224</b>
<b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....</b>	<b>234</b>

---

# ГЛАВА 1. КОМПЛЕКСНАЯ РАСЧЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ МЕТОДИКА ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

---

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 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 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 сложнолегированных 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].

*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 Phacompr [5, 9], New Phacompr [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, 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-11B, CMSX-11C, TMS-162, TMS-196). Выборка сплавов осуществлялась с позиций предоставления химических составов с различными системами легирования, охватывающих широкий диапазон по содержанию основных элементов: С = 0–0,18 мас. %; Cr = 2,0–22,5 мас. %; Со = 3,0–19,0 мас. %; Al = 1,9–6,2 мас. %; Ti = 0–5 мас. %; Мо = 0–6,4 мас. %; W = 0–12,0 мас. %; Nb = 0–1,6 мас. %; Та = 0–12,0 мас. %; Hf = 0–1,5 мас. %; V = 0–1,0 мас. %; Re = 0–9,0 мас. %; Ru = 0–6,0 мас. %, а также экспериментальных данных по группам параметров исследуемых ЖНС [1–3, 9–11].

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  $\gamma$ -твердорастворных упрочнителей ( $\Sigma_\gamma$ ) и  $\gamma'$ -образующих ( $\Sigma_{\gamma'}$ ) элементов [20], объемное количество ( $V_\gamma$ )  $\gamma'$ -фазы [21], параметр коррозии ( $PKC$ ) и параметры структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $Md_\gamma$ ,  $Md_C$ ,  $\Delta E$  [22].

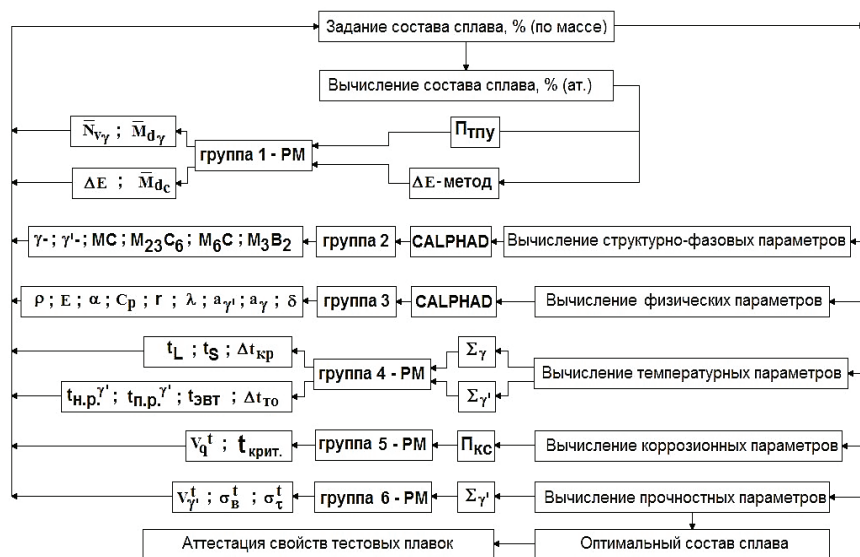


Рис. 1. Общий алгоритм компьютерного расчета разработанной методики КРАМ для проектирования литейных ЖНС с требуемым уровнем служебных характеристик

На рисунке 1 представлен общий алгоритм разработанной методики КРАМ для проектирования литейных 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).

**Основные параметры для многокритериальной  
оптимизации состава при проектировании литейных ЖНС**

<i>Контролируемые параметры</i>	<i>Ед. измер.</i>
Суммарное кол-во электронных вакансий в $\gamma$ -тв. растворе, $Nv_{\gamma}$	–
Суммарное кол-во валентных электронов в $\gamma$ -тв. растворе, $Md_{\gamma}$	–
Параметр дисбаланса системы легирования, $\Delta E = \pm 0,04$	–
Суммарное количество валентных электронов в сплаве, $Md_C$	–
Удельная плотность сплава, $\rho$	г/см <sup>3</sup>
Мисфит $\delta = 2 \cdot (a_{\gamma'} - a_{\gamma}) / (a_{\gamma'} + a_{\gamma})$	%
Температура солидус, $t_S$	°С
Температура полного растворения $\gamma'$ -фазы, $t_{п.р.}^{\gamma'}$	°С
Температура локального плавления эвтектики, $t_{эвт.}$	°С
Средняя скорость коррозии, $V_q^t$	г/м <sup>2</sup> · с
Количество упрочняющей $\gamma'$ -фазы, $V_{\gamma'}^t$	%, мас.
Предел кратковременной прочности, $\sigma_B^t$	МПа
Предел длительной прочности, $\sigma_T^t$	МПа

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.



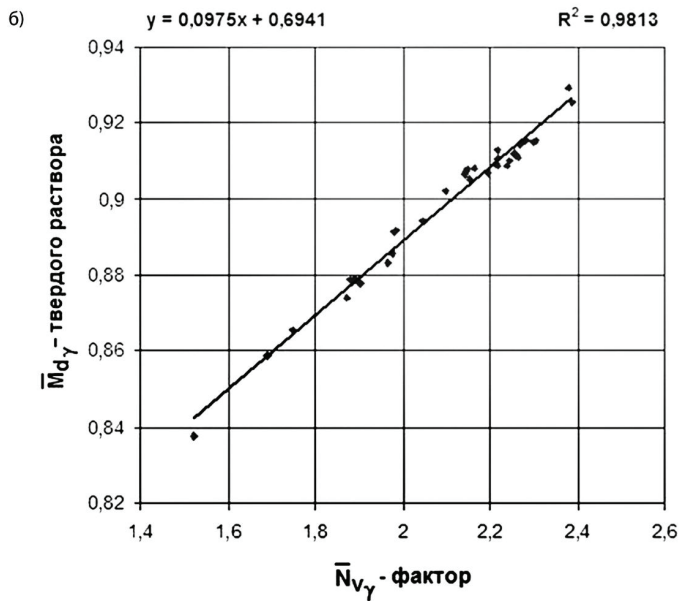
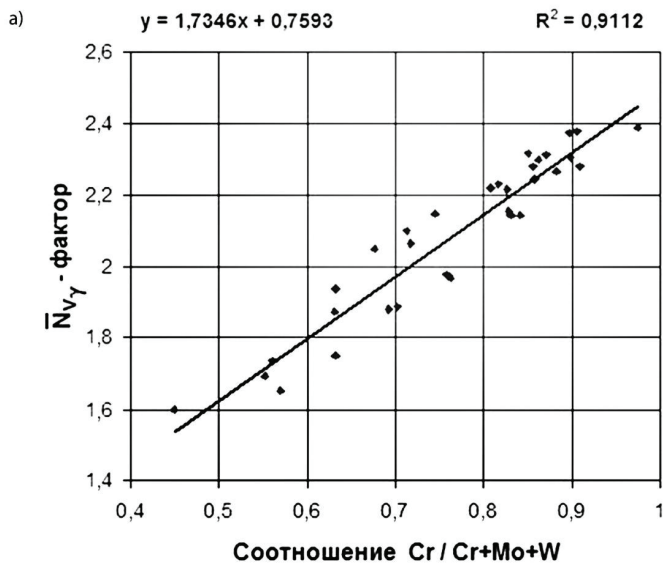
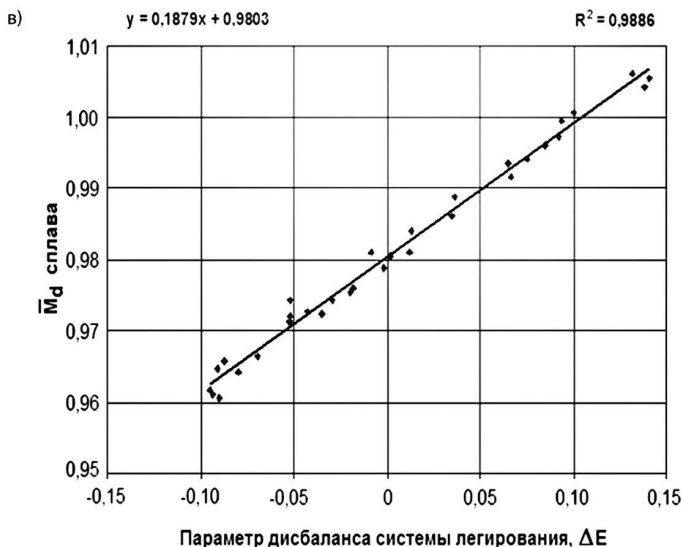


Рис. 2. Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности литейных ЖНС — а, б



*Окончание рис. 2. Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности литейных ЖНС — в*

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  $\gamma$ -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  $\Delta E$ -методом [14, 15], была получена регрессионная модель для расчета параметра структурной стабильности  $\bar{M}d_C$  по величине параметра  $\Delta E$  — 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  $Cr / Cr + Mo + W = P_{III}$ , а параметра  $\bar{M}d_C$  по величине дисбаланса системы легирования  $\Delta E$ , апробированные на исследованных литейных ЖНС. Расчеты проводились в ат. %.

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  $[Cr / Cr + Mo + W] = P_{ТПУ}$  (% ат.), а также зависимость параметра  $Md_C$  от величины дисбаланса системы легирования  $\Delta E$  в исследованных ЖНС наиболее оптимально описывается линейной функцией, имеющей общий вид:  $y = a \cdot x + b$ .

Таблица 2

**Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности (группа 1) литейных ЖНС**

<i>Расч. параметр</i>	<i>Условия стабильности</i>	<i>Кoeff. детерминированности, R<sup>2</sup></i>	<i>Вид регрессионной модели (группа 1)</i>
$P_{ТПУ}$	–	–	$P_{ТПУ} = [Cr : (Cr + Mo + W)]$ , % ат.
$\bar{N}_{V\gamma}$	$\leq 2,45$	0,9112	$N_{V\gamma} = 1,7346 \cdot (P_{ТПУ}) + 0,7593$
$Md_{\gamma}$	$\leq 0,93$	0,9813	$Md_{\gamma} = 0,0975 \cdot (N_{V\gamma}) + 0,6941$
$\Delta E$ [14, 15]	$0,00 \pm 0,04$	–	$\Delta E = \sum E_i \cdot C_i - 0,036 \cdot \sum A_i \cdot C_i - 6,28$
$Md_C$	$0,980 \pm 0,008$	0,9886	$Md_C = 0,1879 \cdot (\Delta E) + 0,9803$

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  $\Delta E$ -метода [23].

Таблица 3

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

<i>Сплав ЗМИ-3У</i>	<i>Параметры структурной стабильности</i>				
	$P_{ТПУ}$	$N_{V\gamma}$	$Md_{\gamma}$	$\Delta E$	$Md_C$
Расчет по РМ	0,8421	2,2200	0,9106	+ 0,0362	0,9871
Phacomr	–	2,1431	–	–	–
New Phacomr	–	–	0,9065	–	0,9833
$\Delta E$ -метод	–	–	–	+ 0,0362	–

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 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 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 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	Кол-во фаз, % масс.		Расчетный химический состав фаз при 20 °С, %, масс.									
	Расч.	Эксп.	C	Co	Cr	Al	Ti	Mo	W	B	Y	Ni
$\gamma$ -	46,07	–	–	9,17	26,05	0,35	0,06	0,52	7,63	–	–	56,22
$\gamma'$ -	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
$M_3B_2$	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]**

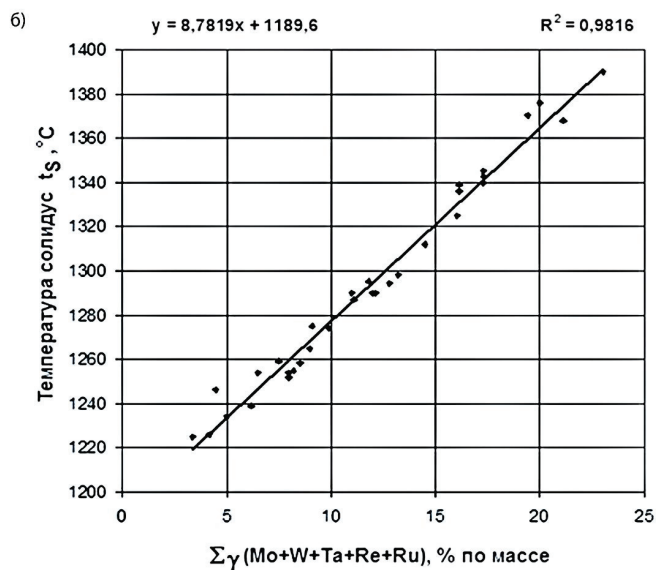
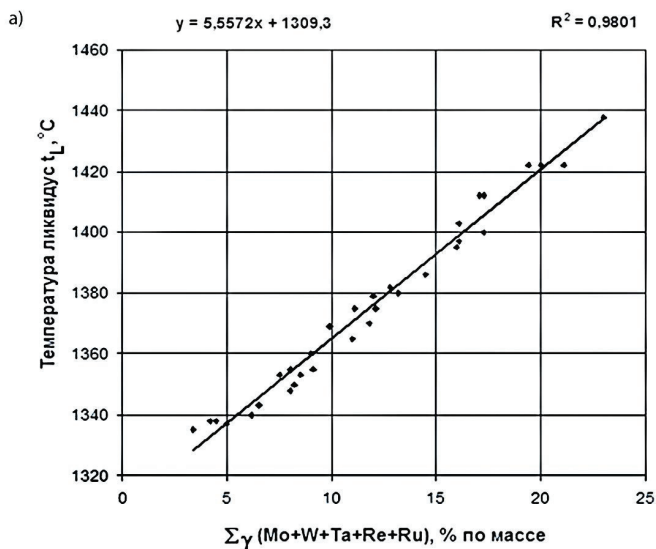
Сплав ЗМИ-3У	Значения физических параметров при 20 °С								
	$\rho$	$E$	$\alpha \cdot 10^6$	$C_p$	$r \cdot 10^6$	$\lambda$	$a_{\gamma'}$	$a_{\gamma}$	$\delta$
Единица измерения	г/см <sup>3</sup>	ГПа	1/К	Дж/г·К	Ом·м	Вт/м·К	А°	А°	%
Расчет	8,29	212,5	12,23	0,430	0,151	10,42	3,5850	3,5780	-0,20
Эксперимент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

**Примечание:**  $\rho$  — удельная плотность;  $E$  — модуль упругости Юнга;  $\alpha$  — коэффициент термического расширения;  $C_p$  — удельная теплоемкость;  $r$  — удельное электросопротивление;  $\lambda$  — теплопроводность;  $a_{\gamma'}$  — параметр кристаллической решетки  $\gamma'$ -фазы;  $a_{\gamma}$  — параметр кристаллической решетки  $\gamma$ -твердого раствора;  $\delta$  — (мисфит)размерное несоответствие параметров решеток.

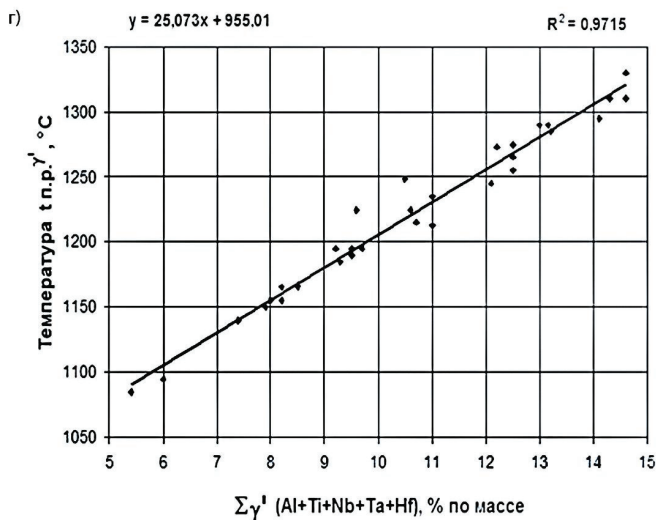
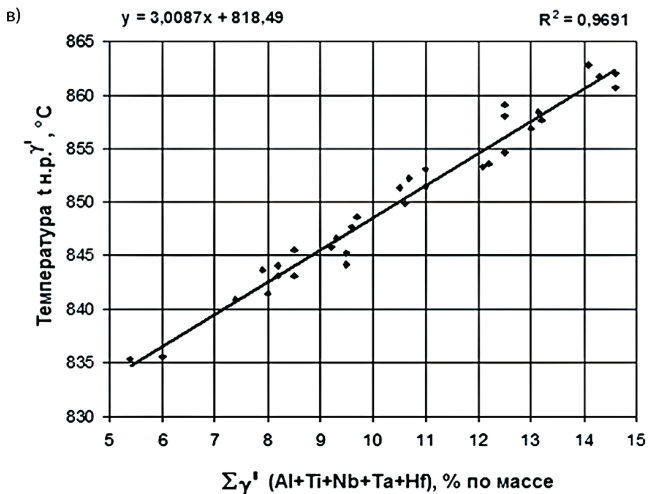
Таблица 7

**Математические регрессионные модели для расчета температурных параметров (группа 4) литейных ЖНС**

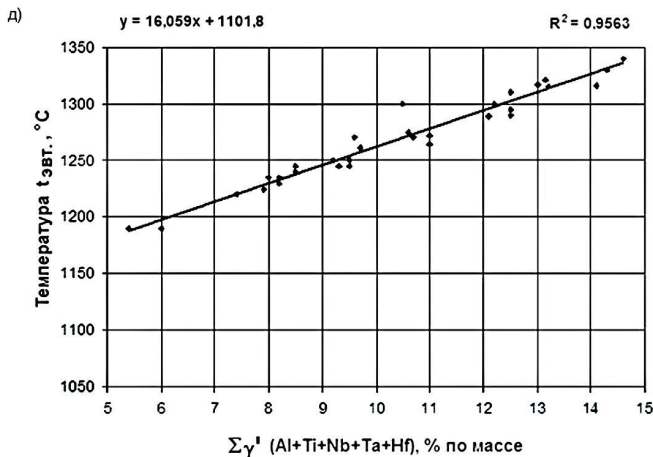
Расчетный параметр	Единица измерения	Коэффициент детерминированности, $R^2$	Вид регрессионной модели (группа 4)
$\Sigma C_i^{\gamma}$	%, масс.	—	$\Sigma C_i^{\gamma} = Mo + W + Ta + Re + Ru$
$t_L$	°С	0,9801	$t_L = 5,5572 \cdot (\Sigma C_i^{\gamma}) + 1309,3$
$t_S$	°С	0,9816	$t_S = 8,7819 \cdot (\Sigma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



*Рис. 3. Математические регрессионные модели для расчета температур  $t_L$ ,  $t_{Sno}$  величине  $\Sigma C_i^{\gamma}$  и температур  $t_{ЭВТ}$ ,  $t_{П.Р.}^{\gamma}$ ,  $t_{Н.Р.}^{\gamma}$  по величине  $\Sigma C_i^{\gamma}$  в составе литейных ЖНС — а, б*



*Продолжение рис. 3. Математические регрессионные модели для расчета температур  $t_L$ ,  $t_{SnO}$  величине  $\Sigma C_i^{\gamma}$  и температур  $t_{ЭВТ}$ ,  $t_{П.Р.}^{\gamma}$ ,  $t_{н.р.}^{\gamma}$  по величине  $\Sigma C_i^{\gamma}$  в составе литейных ЖНС — в, з*



*Окончание рис. 3. Математические регрессионные модели для расчета температур  $t_L$ ,  $t_{Sn0}$  величине  $\Sigma C_i^{\gamma'}$  и температур  $t_{ЭВТ.}$ ,  $t_{П.Р.}^{\gamma'}$ ,  $t_{Н.Р.}^{\gamma'}$  по величине  $\Sigma C_i^{\gamma'}$  в составе литейных ЖНС —  $\delta$*

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

Таблица 8

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

Сплав ЗМИ-3У	Значения температурных параметров, $^\circ\text{C}$								
	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$t_L$	$t_S$	$\Delta t_{кр.} = t_L - t_S$	$\Sigma C_i^{\gamma'}$	$t_{ЭВТ.}$	$t_{П.Р.}^{\gamma'}$	$t_{Н.Р.}^{\gamma'}$	$\Delta t_{ГО} = t_{ЭВТ.} - t_{П.Р.}^{\gamma'}$
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

Из рисунка 3 видно, 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  $t_{Н.Р.}^{\gamma'}$  и полного растворения  $t_{П.Р.}^{\gamma'}$  основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы от суммы  $\gamma'$ -образующих



элементов  $\Sigma C_i^{z'}$  (группа 4) хорошо коррелируют и оптимально описываются линейной функцией, имеющей общий вид:  $y = a \cdot x + b$ .

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  $\Pi_{\text{КС}}$ . Математические РМ получены в результате математической обработки базы экспериментальных данных и апробированы на исследованных ЖНС.

Таблица 9

**Математические модели для расчета средней скорости коррозии  $V_q^t$  и критической температуры  $t_{\text{КРИТ.}}$  коррозии для литейных ЖНС**

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

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  $\Pi_{\text{КС}}$  исследованных ЖНС при разных температурах описывается экспоненциальной функцией, имеющей общий вид  $y = a \cdot \exp^{-bx}$ .

Из рисунка 4 также видно, что наиболее оптимально зависимость критической температуры коррозии  $t_{\text{КРИТ.}}$  (группа 5) от величины параметра коррозии  $\Pi_{\text{КС}}$  исследованных ЖНС описывается степенной функцией, имеющей общий вид  $y = a \cdot x^b$ .

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  $t_{\text{КРИТ.}}$  (группа 5), которые проводились по апробированным математическим регрессионным моделям, в сравнении с экспериментальными данными для сплава ЗМИ-3У [23].

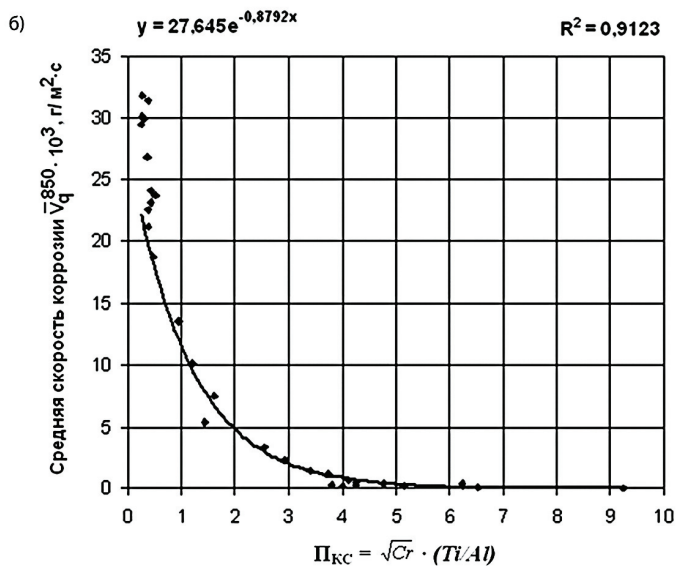
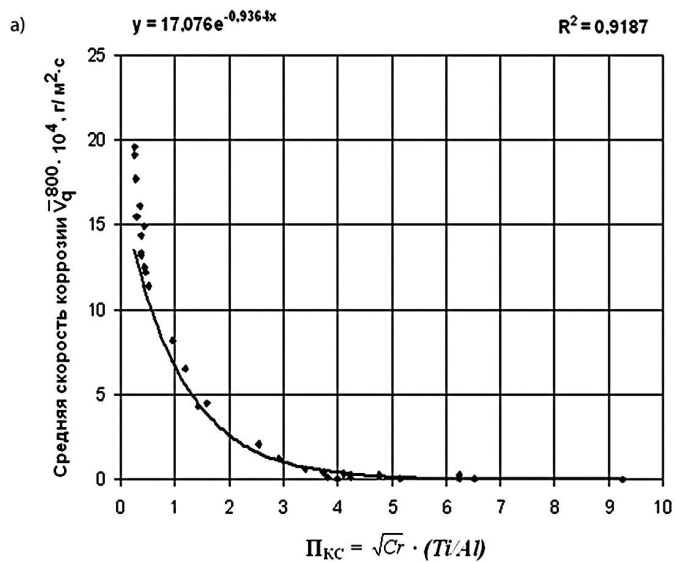
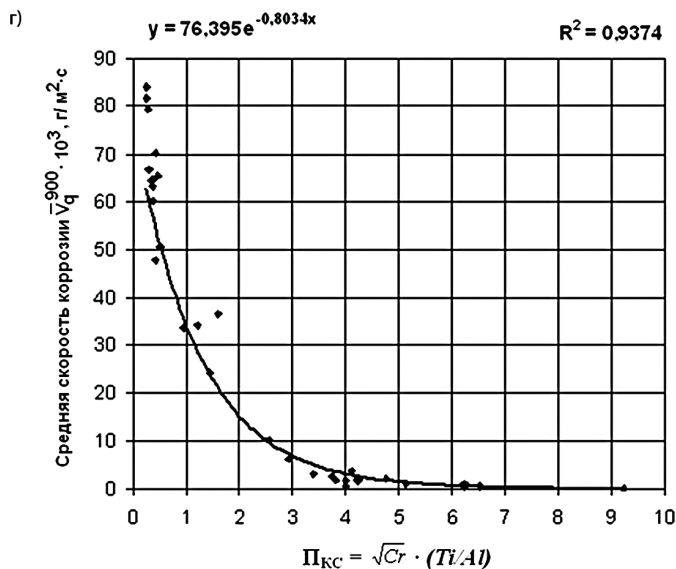
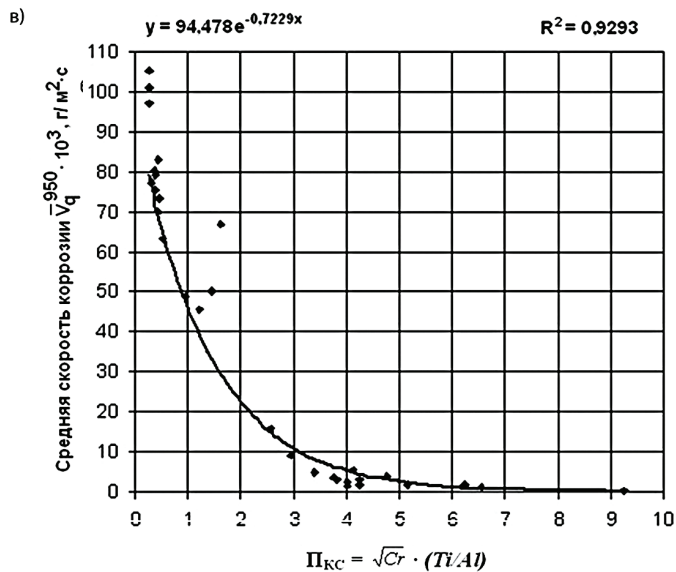
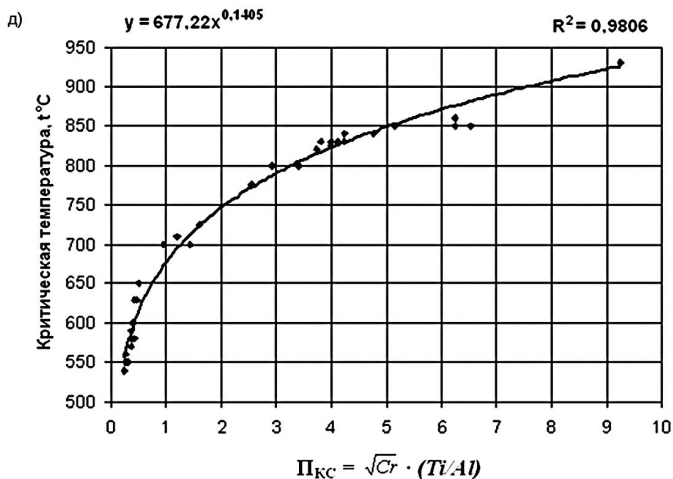


Рис. 4. Математические регрессионные модели для расчета средней скорости коррозии  $V_q^t$  и критической температуры  $t_{\text{КРИТ}}$  по величине параметра коррозии  $\Pi_{\text{КС}}$  литейных ЖНС: а —  $V_q^{800}$ ; б —  $V_q^{850}$



Продолжение рис. 4. Математические регрессионные модели для расчета средней скорости коррозии  $V_q^t$  и критической температуры  $t_{КРИТ.}$  по величине параметра коррозии  $\Pi_{KC}$  литейных ЖНС: в —  $V_q^{950}$ ; г —  $V_q^{900}$



Окончание рис. 4. Математические регрессионные модели для расчета средней скорости коррозии  $V_q^t$  и критической температуры  $t_{\text{КРИТ.}}$  по величине параметра коррозии  $\Pi_{\text{КС}}$  литейных ЖНС:  $\delta$  —  $t_{\text{КРИТ.}}$

Таблица 10

Сравнительные значения расчетных и экспериментальных значений коррозионных параметров (группа 5) при разных температурах для сплава ЗМИ-ЗУ [23]

Сплав ЗМИ-ЗУ	Коррозионные параметры, $\text{г} / \text{м}^2 \cdot \text{с}$					
	$\Pi_{\text{КС}}$	$V_q^{800} \cdot 10^4$	$V_q^{850} \cdot 10^3$	$V_q^{900} \cdot 10^3$	$V_q^{950} \cdot 10^3$	$t_{\text{КРИТ.}}, ^{\circ}\text{C}$
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

В таблице 11 и на рисунке 5 представлены математические регрессионные модели (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.

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

имеющей вид:  $y = -a \cdot x^2 + b \cdot x + c$  (квадратичный полином второй степени).

Таблица 11

Математические модели для расчета количества основной упрочняющей фазы  $V_{\gamma^t}$  (группа б) в литейных ЖНС при разных температурах

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

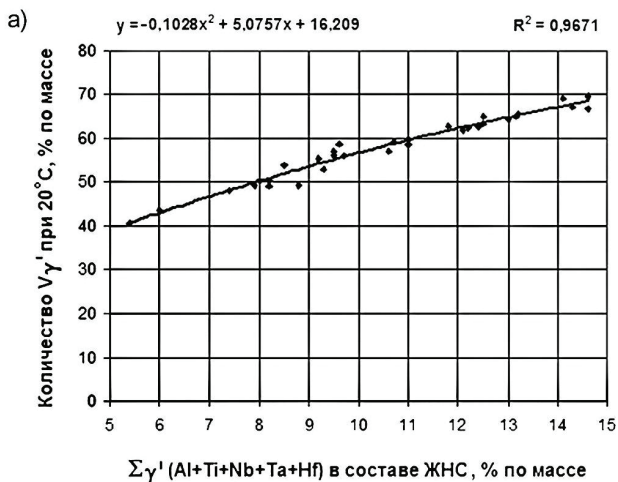
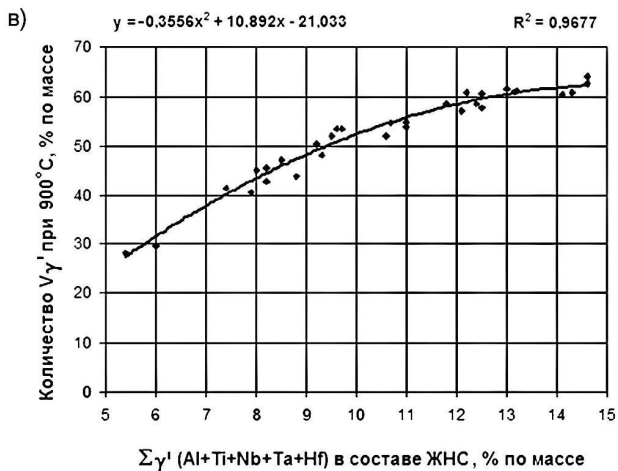
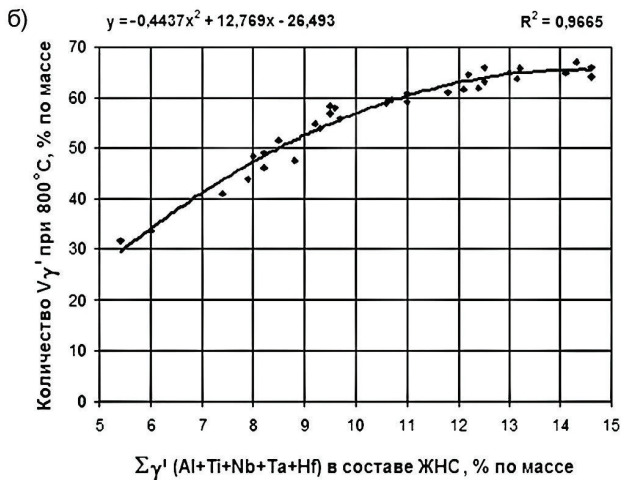
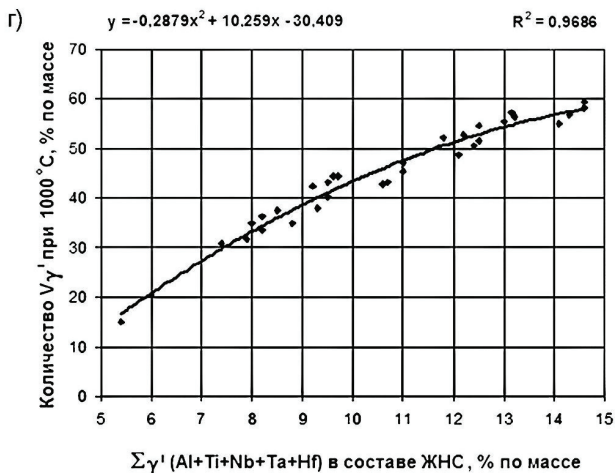


Рис. 5. Математические регрессионные модели для расчета количества  $V_{\gamma^t}$  фазы по суммарному содержанию  $\Sigma C_i^{\gamma^t}$  образующих элементов в составе ЖНС: а — 20 °С



*Продолжение рис. 5. Математические регрессионные модели для расчета количества  $V_{\gamma^1}$   $\gamma^1$ -фазы по суммарному содержанию  $\Sigma C_i^{\gamma^1}$   $\gamma^1$ -образующих элементов в составе ЖНС: б —  $800^{\circ}\text{C}$ ; в —  $900^{\circ}\text{C}$*



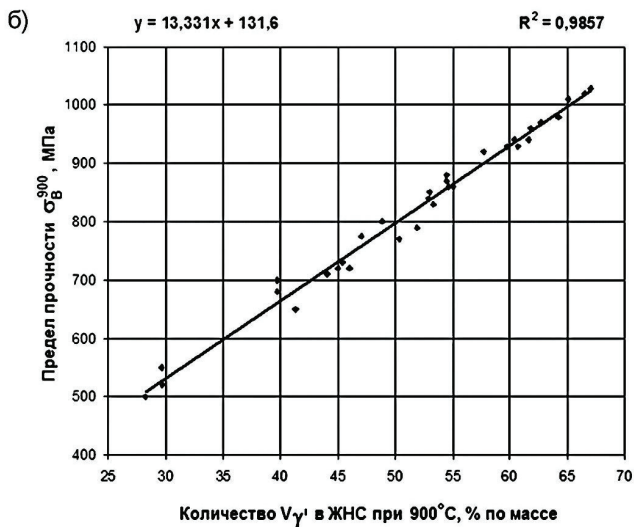
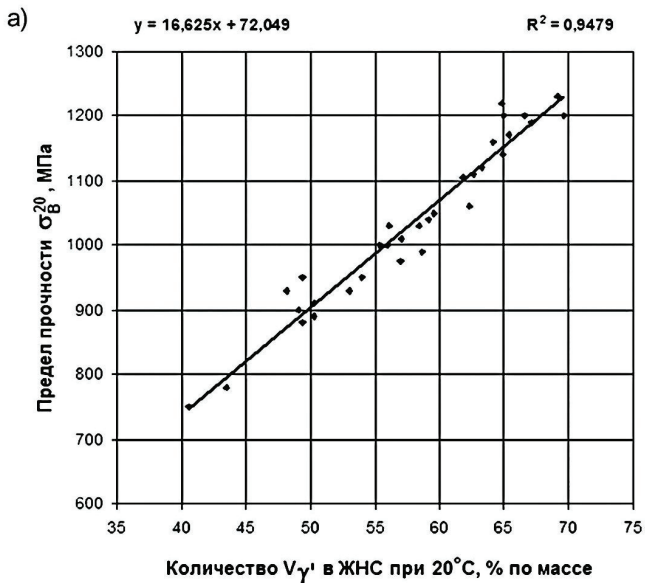
Окончание рис. 5. Математические регрессионные модели для расчета количества  $V_{\gamma'}$   $\gamma'$ -фазы по суммарному содержанию  $\Sigma C_{\gamma'}$   $\gamma'$ -образующих элементов в составе ЖНС:  $z$  — 1000 °С

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

Таблица 12

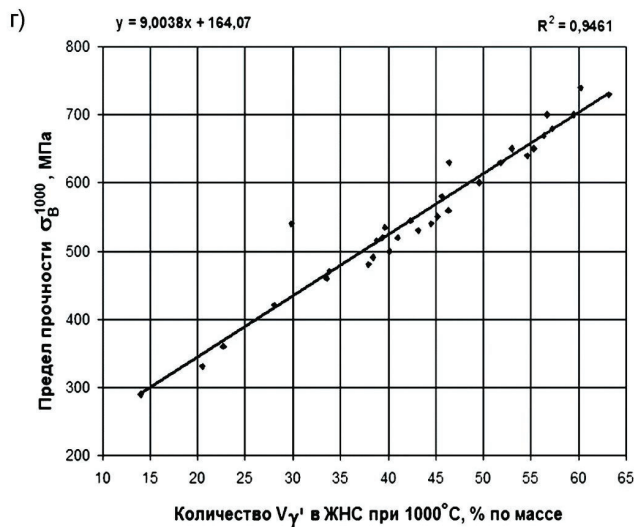
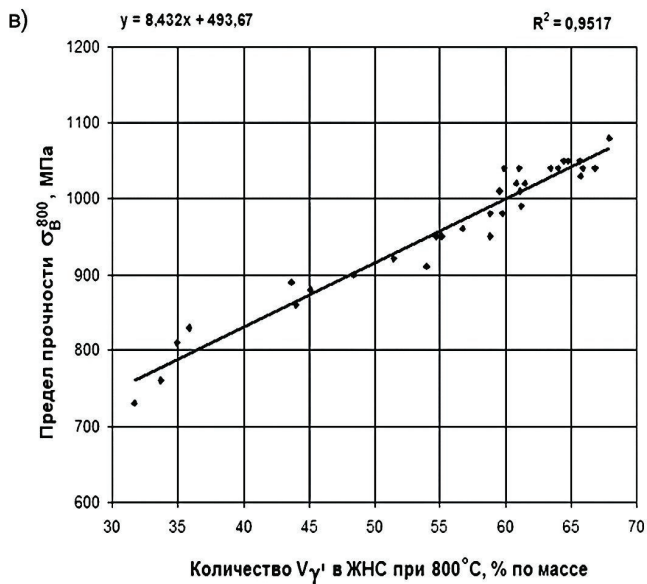
Математические модели для расчета предела кратковременной прочности  $\sigma_B^t$  (группа б) по количеству упрочняющей фазы  $V_{\gamma'}$  литейных ЖНС

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



*Рис. 6. Математические регрессионные модели для расчета предела кратковременной прочности  $\sigma_B$  по количеству  $\gamma'$ -фазы  $V\gamma'$  влитейных ЖЧС:*  
*a —  $20^\circ\text{C}$ ; б —  $800^\circ\text{C}$*





Окончание рис. 6. Математические регрессионные модели для расчета предела кратковременной прочности  $\sigma_B^t$  по количеству  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}$  влитых ЖНС:  
 $v$  —  $900^\circ\text{C}$ ;  $z$  —  $1000^\circ\text{C}$

На рисунке 7 и в таблице 13 представлены математические регрессионные модели для расчета предела 100- и 1000-часовой длительной прочности  $\sigma_{\tau}^t$  (группа б) по количеству основной упрочняющей  $\gamma'$ -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  $\sigma_B^t$  и длительной  $\sigma_{\tau}^t$  прочности от количества основной упрочняющей  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}^t$  (группа б) при разных температурах наиболее оптимально описывается линейной функцией, имеющей вид:  $y = a \cdot x + b$ . В таблицах 14, 15 представлены расчетные значения количества основной упрочняющей фазы  $V_{\gamma'}^t$ , а также пределов кратковременной  $\sigma_B^t$  и длительной  $\sigma_{\tau}^t$  прочности (группа б), которые проводились по полученным математическим регрессионным моделям, представленных на рисунках 5–7 и в таблицах 10–12, в сравнении с экспериментальными данными для сплава ЗМИ-3У [23].

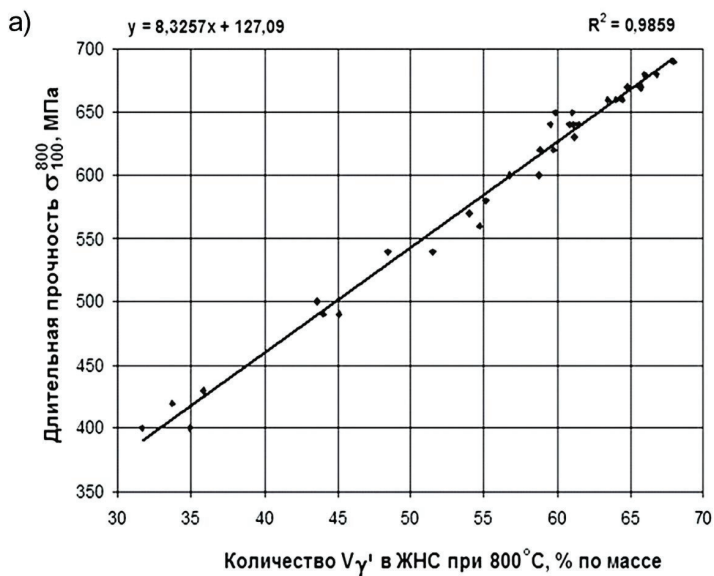


Рис. 7. Математические регрессионные модели для расчета предела 100- и 1000-часовой длительной прочности  $\sigma_{\tau}^t$  по количеству  $\gamma'$ -фазы  $V_{\gamma'}^t$  в литейных ЖНС: а —  $\sigma_{100}^{800}$