

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ УПРУГОСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ОЦК МЕТАЛЛОВ

В.Е. Бахрушин, С.В. Галенко, Р.Я. Шумада

Классический приватный университет, ул. Жуковского, 70-б, Запорожье, Украина, 69002
Vladimir.Bakhrushin@zhu.edu.ua

Предложена методика идентификации математических моделей температурных зависимостей динамических модулей упругости твердых растворов внедрения на основе ОЦК металлов, основанная на предварительной идентификации моделей соответствующих спектров внутреннего трения и применении квазиньютоновских методов нелинейной минимизации целевого функционала.

Введение

Для изучения релаксационных процессов в твердых телах широко используют методы внутреннего трения, упругого последования, релаксации напряжений и релаксации модулей (нормальной упругости или сдвига) [1 – 3]. Они проявляют высокую чувствительность к локальному окружению и состоянию примесных атомов и дают возможность получить ценную информацию о тонкой структуре твердых растворов. Особенностью методов, основанных на анализе температурных зависимостей динамических модулей упругости, является то, что они используют результаты измерения резонансной частоты колебаний образца, которую определяют и в большинстве методик исследования внутреннего трения [2]. Это дает возможность изучать соответствующие процессы одновременно на одном образце и, вследствие этого, получать более полную и точную информацию о механизмах и особенностях релаксации. Серьезной проблемой, существующей при анализе сложных релаксационных процессов, является отсутствие достаточно надежных методик выделения элементарных процессов и определения их параметров. Ранее нами были предложены [4, 5] алгоритмы и методики автоматической идентификации математических моделей сложных релаксационных спектров, основанные на применении квазиньютоновских методов минимизации целевого функциона-

ла, представляющего собой сумму квадратов остатков модели, и комплекса критериев проверки адекватности получаемых моделей.

Целью данной статьи является разработка методики идентификации математических моделей температурных зависимостей динамических модулей упругости, основанной на тех же принципах и использовании предварительной информации о параметрах математических моделей соответствующих релаксационных спектров.

1. Математическая модель сложного релаксационного спектра

Релаксационный спектр ОЦК твердых растворов внедрения в области релаксации Снука во многих практически важных случаях можно представить [1] математической моделью:

$$Q^{-1} = \sum_{i=1}^n Q_{0i}^{-1} \cosh^{-1} \left[\frac{E_i}{RT} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{0i}} \right) \right], \quad (1)$$

где n – число элементарных пиков, Q_{0i}^{-1} , E_i , T_{0i} – соответственно, высота, энергия активации и температура i -го релаксационного пика, R – универсальная газовая постоянная, T – температура. Энергия активации релаксации, обусловленной перескоками атомов примесей внедрения по междоузлиям ОЦК решетки, связана с температурой соответст-

вующего максимума внутреннего трения формулой Верта-Маркса [2]:

$$E_i = RT_{0i} \ln \frac{kT_{0i}}{hf}, \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана, h – постоянная Планка, f – частота колебаний образца.

Для определения составляющих релаксационного спектра и их параметров обычно используют модель (1, 2), минимизируя значение функционала:

$$S = \sum_{j=1}^m (Q_j^{-1} - Q^{-1}(T_j))^2, \quad (3)$$

где Q_j^{-1} – экспериментальное значение внутреннего трения при температуре T_j , $Q^{-1}(T_j)$ – значение внутреннего трения, рассчитанное для той же температуры на основе модели (1, 2), m – число экспериментальных точек. Параметры, удовлетворяющие условию (3), определяют с помощью метода наименьших квадратов, а также различных итерационных процедур [2, 6, 7]. Основную сложность представляет нахождение количества элементарных процессов, которое осуществляют субъективно. В [1, 4, 5] нами предложена методика автоматической идентификации математических моделей сложных спектров, основанная на применении квазинытоновских алгоритмов минимизации функционала (3). Для проверки адекватности модели используется комплекс критериев, который включает:

- критерий Дарбина – Уотсона (проверка автокорреляции остатков, позволяет исключить модели с недостаточным количеством релаксационных процессов);

- критерий Фишера (отношение дисперсии остатков к дисперсии погрешности измерений внутреннего трения; позволяет исключить модели с недостаточным количеством релаксационных процессов, а в отдельных случаях и модели с избыточными процессами);

- критерий квазиуни-modalности целевого функционала (предполагает, что чис-

ло его локальных минимумов равно числу релаксационных пиков в рассматриваемой модели; позволяет исключить модели с лишними релаксационными процессами).

На рис. 1 показан пример разложения сложного спектра на элементарные пики, выполненного с применением такого подхода.

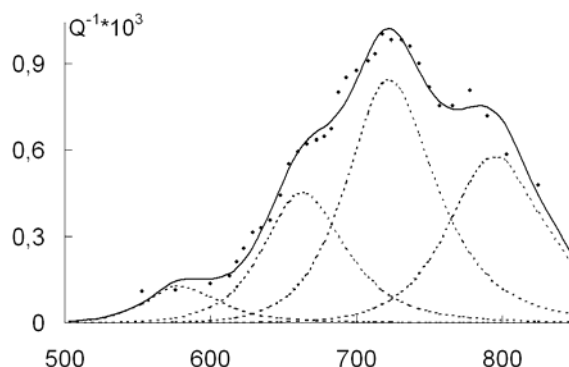


Рис. 1. Релаксационный спектр сплава Nb – Hf – N и результат его декомпозиции.

2. Математическая модель температурной зависимости динамического модуля упругости

Если релаксация подчиняется зинеровской модели стандартного линейного тела, то температурную зависимость модуля упругости можно описать [1 – 3] выражением:

$$M = M_H - \frac{M_H - M_P}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad (4)$$

где M_H и M_P – соответственно, нерелаксированный и релаксированный (низкотемпературный и высокотемпературный) модули, $\omega = 2\pi f$, $\tau = \tau_0 \exp(E/RT)$ – время релаксации. Параметр τ_0 можно определить из условия $\omega\tau = 1$ при $T = T_0$. Реальные релаксационные процессы могут отклоняться от такой модели. В [8] нами было показано, что для дегазированных ниобия и сплавов ниобий-вольфрам поведение динамических модулей качественно соответствует модели Зинера, но имеется существенное различие между экспериментальными и теоретическими значениями отношений высот релаксационных

пиков к соответствующим дефектам модуля. Ее причиной может быть наложение нескольких релаксационных процессов с близкими параметрами. В этом случае дефект модуля будет представлять собой аддитивную сумму вкладов, обусловленных каждым из процессов. Высота же релаксационного пика будет меньше суммы высот элементарных пиков, поскольку они смещены друг относительно друга по шкале температур.

Принимая указанное выше предположение, математическую модель температурной зависимости динамического модуля упругости можно записать в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} M(T) = E_H - \sum_{i=1}^n \Delta M_i(T); \\ \Delta M_i(T) = \frac{\Delta M_{0i}}{1 + 4\pi^2 \tau_i^2 f^2}; \\ \tau_i = \frac{\exp\left[\frac{E_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{0i}}\right)\right]}{2\pi f}. \end{array} \right. \quad (5)$$

Ее параметры (парциальные дефекты модуля ΔM_{0i} и температуры релаксационных пиков T_{0i}) можно определить из условия минимума функционала:

$$S_1 = \sum_{j=1}^m [M_j - M(T_j)]^2, \quad (6)$$

где M_j – экспериментально найденное значение модуля для температуры T_j .

Функционал (6) не является квазиуни-модальным при любом количестве заданных в модели релаксационных процессов и имеет большое число локальных минимумов при любых n . Поэтому результат его минимизации определяется заданными начальными условиями, что не позволяет использовать для идентификации модели подход, применявшийся нами для релаксационных спектров.

Для решения этой проблемы предлагается учесть, что в области применимости

модели стандартного линейного тела иско-мые параметры модели температурной зави-симости динамического модуля упругости однозначно связаны с параметрами модели релаксационного спектра того же самого об-разца. Поэтому для получения их физически адекватных значений возможна такая проце-дура совместного анализа релаксационных спектров внутреннего трения и температур-ных зависимостей динамических модулей упругости.

На первом этапе на основе иденти-фикации математических моделей релаксаци-онных спектров находим температуры эле-ментарных пиков, которые далее используем в качестве начального приближения значе-ний T_{0i} при анализе температурных зависи-мостей модулей. В качестве начальных зна-чений парциальных дефектов модулей мож-но взять величины $\Delta M_{0i} = \frac{M_H Q_{0i}^{-1}}{2}$. При ус-

ловии малости суммарной величины дефекта модуля, которое практически всегда выпол-няется для области релаксации Снука, это соответствует гипотезе, что каждый из эле-ментарных релаксационных процессов отве-чает модели стандартного линейного тела.

При таком подходе значения темпера-тур пиков в процессе минимизации функ-ционала (6) практически не изменяются. Значения парциальных дефектов модуля из-меняются заметно, что связано с меньшей точностью их вычисления. Однако существ-вует хорошая корреляция (коэффициент Пирсона равен 0,90 – 0,97) между рассчи-танными в рамках предлагаемого подхода высотами парциальных пиков внутреннего трения и соответствующих дефектов модуля. При этом отношение

$$\frac{Q_{0i}^{-1}}{\Delta M_{0i} / M_H} = 2,00 \pm 0,15, \quad (7)$$

что хорошо соответствует модели стандар-тного линейного тела. Сравнение экспери-ментальных и модельных температурных за-висимостей динамических модулей нор-мальной упругости приведено на рис. 2.

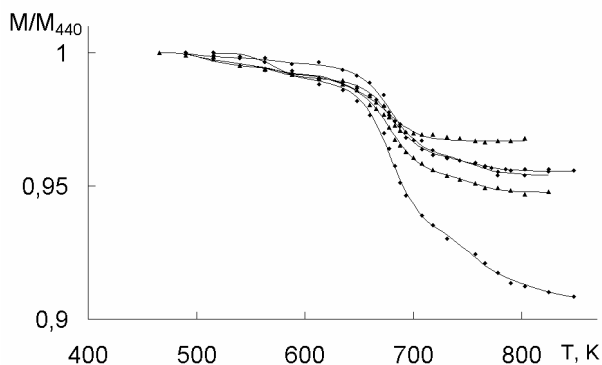


Рис. 2. Результат идентификации моделей температурных зависимостей динамического модуля нормальной упругости сплавов Nb – W – N.

3. Проверка адекватности модели

Для проверки адекватности модели использовали такие критерии [9]:

- критерий Фишера (проверка близости дисперсии остатков модели к дисперсии погрешностей экспериментальных значений модуля упругости);

- Z-критерий и t-критерий Стьюдента (равенство нулю среднего значения остатков модели);

- критерий Дарбина-Уотсона (отсутствие автокорреляции первого порядка для остатков);

- построение P-P диаграммы и критерий Смирнова (проверка нормальности распределения остатков).

При использовании критерия Фишера проверяли выполнение условий:

$$\frac{S}{\Delta^2} \leq F, \quad \frac{\Delta^2}{S} \leq F, \quad (8)$$

где S – значение целевого функционала (6), Δ^2 – сумма квадратов погрешностей определения значений модуля упругости по всем экспериментальным точкам, F – критическое значение критерия Фишера для выбранного уровня значимости.

Невыполнение первого из указанных условий должно свидетельствовать о недостаточном количестве учитываемых в модели релаксационных процессов, а невыполнение второго – о введении избыточных процессов.

Недостатком критерия Фишера в рассматриваемом случае является низкая точность определения дисперсии экспериментальной погрешности из-за невозможности проведения повторных экспериментов.

Среднее значение остатков моделей, идентифицированных по предлагаемой методике, значительно не отличается от нуля на уровне значимости 0,1 – 0,15. В данном случае такой результат можно считать приемлемым.

Значение критерия Дарбина-Уотсона рассчитывали по формуле:

$$d = \frac{\sum_{j=2}^m (e_j - e_{j-1})^2}{\sum_{j=1}^m e_j^2}, \quad (9)$$

где $e_j = M_j - M(T_j)$ – остатки модели. Для адекватной модели должно выполняться условие $d \approx 2$. Близкие к нулю значения d свидетельствуют о наличии положительной автокорреляции, а значения, близкие к 4, – об отрицательной автокорреляции. Для данных рис. 2 значение этого критерия составило 1,53, что свидетельствует о незначительности автокорреляции остатков.

Для проверки нормальности распределения остатков использовали P-P диаграммы пакета статистического анализа SPSS, а также критерий Смирнова. На рис. 3 приведены характерный вид P-P диаграмм для получаемых моделей температурной зависимости динамических модулей упругости. Из них видно, что отклонения остатков от нормального распределения незначительны. Этот вывод подтверждается результатами проверки по критерию Смирнова, расчетное значение которого для данных рис. 2 составило 0,41, что существенно ниже критического значения 0,895 (для уровня значимости 0,05). На рис. 4 показан график эмпирической функции распределения остатков в сравнении с соответствующей функцией нормального распределения.

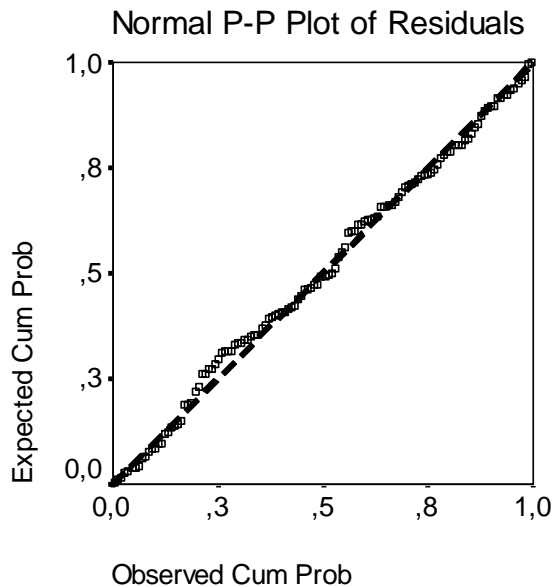


Рис. 3. SPSS P-P диаграмма остатков модели

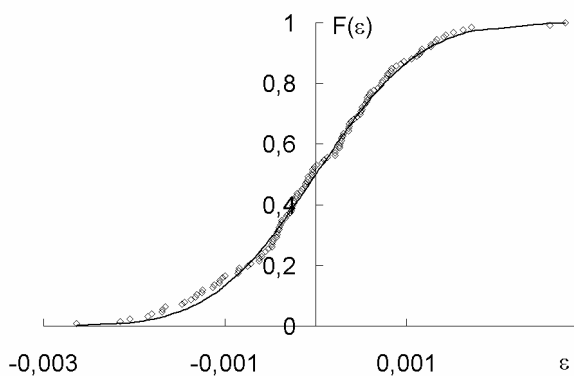


Рис. 4. Графики эмпирической функции распределения остатков и соответствующей функции нормального распределения

Выводы

1. Предложена методика идентификации математических моделей температурных зависимостей динамических модулей упругости ОЦК сплавов внедрения в области релаксации Снука, основанная на применении квазиньютоновской минимизации целевого функционала, который характеризуют среднеквадратичное отклонение модели от экспериментальных точек и результатов предварительной идентификации математических моделей соответствующих релаксационных спектров.

2. Модель сложного релаксационного процесса в области релаксации Снука можно представить как сумму параллельно проте-

кающих процессов, каждый из которых соответствует модели стандартного линейного тела.

3. Проведена проверка адекватности получаемых моделей на основе системы критериев, проверяющих свойства остатков модели.

Литература

1. Бахрушин В.С., Чиріков О.Ю. Моделі та механізми механічної релаксації, пов'язаної з перебудовою домішково-дефектної підсистеми кристалів. – Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ", 2004. – 140 с.

2. Метод внутреннего трения в металловедческих исследованиях / Блантер М.С., Пигузов Ю.В., Агмарин Г.М. и др. – М.: Металлургия, 1991. – 248 с.

3. Анализ сложных релаксационных спектров внутреннего трения на ЭВМ / А.И. Ефимов, О.Н. Разумов, А.Л. Созинов, П.Г. Яковенко // Внутреннее трение в металлах и неорганических материалах. – М.: Наука, 1982. – С. 31 – 35.

4. Бахрушин В.Е., Шумада Р.Я. Идентификация математических моделей сложных релаксационных спектров // Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем / Под ред. Л.А. Уваровой, А.А. Самарского, Ю.М. Соломенцева и др. – М.: 2008. – Вып. 11. – С. 39 – 43.

5. Бахрушин В.Е., Шумада Р.Я. Исследование критериев адекватности математических моделей сложных релаксационных спектров // Моделирование – 2008: Сб. трудов конференции. 14–16.05.2008, Киев. – В 2 т. – Т. 1. – С. 38 – 42.

6. Computer Analyses of Complex Relaxation Spectra / M.S. Ahmad, D.E. Barrow, E.A. Little, Z.S. Szkopiak. // J. Physics. – 1971. – D4, № 10. – P. 1460 - 1469.

7. Анализ сложных релаксационных спектров внутреннего трения на ЭВМ / А.И. Ефимов, О.Н. Разумов, А.Л. Созинов, П.Г. Яковенко // Внутреннее трение в металлах и неорганических материалах. – М.: Наука, 1982. – С. 31 – 35.

8. Бахрушин В.Е., Чиріков А.Ю. Влияние термических обработок на процессы ме-

ханической релаксации в твердых растворах внедрения на основе ниобия // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Вакуум, чис-

тые материалы, сверхпроводники. – 2002. – № 1 (12). – С. 112 – 117.

9. Бахрушин В.Є. Аналіз даних. - Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ", 2006. – 128 с.