

О ЛОГИСТИЧЕСКОЙ АППРОКСИМАЦИИ ЭФФЕКТИВНОЙ ПОРИСТОСТИ ДЛЯ ОБРАЗЦОВ ПОРИСТОГО ТИТАНА

П.В. Москалев^{1,2}, В.Ф. Селиванов², Д.И. Бокарев², А.А. Краснов², А.В. Нетреба²

¹ *Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»*

² *Воронежский государственный технический университет*

Аннотация. Рассматриваются статистические модели для анализа зависимости эффективной от полной пористости для образцов пористого титана, полученных прессованием с последующим спеканием при различной степени уплотнения. Показано, что аппроксимация данной зависимости может быть построена на основе логистической функции. Статистические оценки коэффициентов логистической модели получены с помощью нелинейного метода наименьших квадратов и помимо математического ожидания верхнего предела эффективной пористости позволяют оценить критическое значение общей пористости, в окрестности которого вариации эффективной пористости образцов достигают своего максимума.

Ключевые слова: пористый титан, эффективная пористость, нелинейный метод наименьших квадратов, логистическая функция.

Введение

Внутренний объем пористых материалов V складывается из трех слагаемых: объема открытых V_0 , объема тупиковых V_1 и объема закрытых V_2 пор. Для образцов цилиндрической формы будем считать, что открытые поры сообщаются хотя бы с верхней и нижней поверхностями пористого образца, тупиковые поры — только с его боковой поверхностью, а закрытые поры не сообщаются ни с одной из них. На рис. 1а показан пример формирования порового пространства в поперечном сечении образца пористого титана радиусом 8 мм с общей пористостью $\Pi_t = 0,473$ и эффективной пористостью $\Pi_e = 0,413$. Белый цвет на рис. 1 соответствует титановой матрице, светло-серый цвет — открытым порам, темно-серый цвет — тупиковым порам, а черный цвет — закрытым порам.

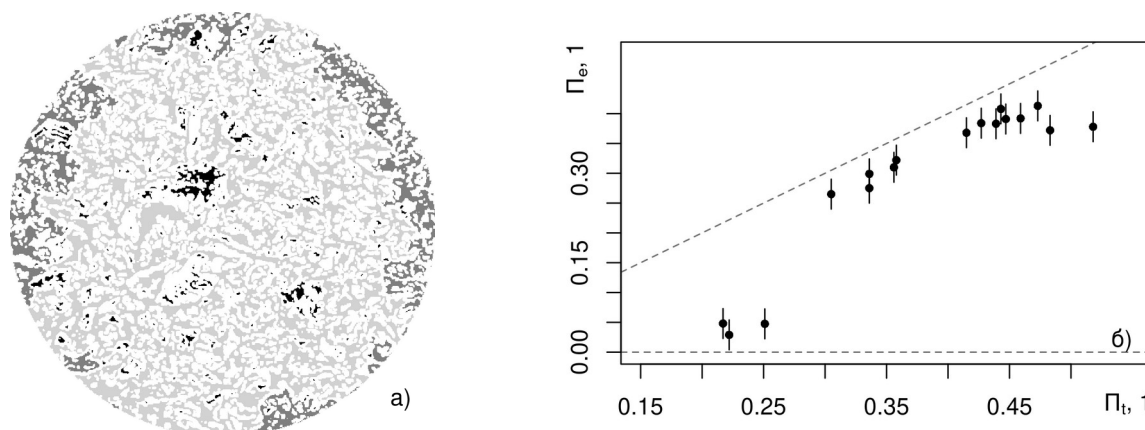


Рис. 1. Анализ пористости образцов пористого титана: а) поровое пространство в поперечном сечении образца; б) выборка экспериментальных данных $\{\Pi_{ei}(\Pi_{ti})\}$

Полная Π_t и эффективная Π_e пористости образца определяются отношениями, аналогичными геометрическим определениям вероятности:

$$\Pi_t = (V_0 + V_1 + V_2)/V_t; \quad \Pi_e = (V_0 + V_1)/V_t, \quad (1)$$

где объемы V_t и V_i при $i = 0, 1, 2$ измеряются в одноименных единицах.

Следует отметить, что существующими методами анализа пористых металлов достаточно точно можно определять лишь их полную пористость Π_t , поскольку надежно различать открытые и тупиковые поры достаточно трудно, из-за способности последних частично заполняться газами и жидкостями под влиянием сорбционных, капиллярных, гравитационных и иных сил при проведении порометрических испытаний. Указанные эффекты способны оказывать значимое влияние на оценку эффективной пористости Π_e образца [1, 2].

1. Построение выборки экспериментальных данных

На рис. 1б показана выборка экспериментальных данных отражающих эмпирически наблюдаемую зависимость эффективной пористости от полной $\{\Pi_e(\Pi_t)\}$ для образцов пористого титана, полученных прессованием титанового порошка марки ПТЭК с последующим спеканием при различной степени уплотнения заготовок. Спекание проводилось в металлическом герметизируемом контейнере при средней абсолютной температуре порядка 1288 К и остаточном давлении 0,1 Па [3]. Эффективная пористость оценивалась гравиметрическим методом по приращениям массы сухих и насыщенных дистиллированной водой образцов. Эти исследования были выполнены весной-летом 2023 года в Воронежском государственном техническом университете.

Вертикальные отрезки соответствуют предельной абсолютной погрешности оценок эффективной пористости $|\varepsilon_i| \leq 0,05$. Можно увидеть, что полная пористость образцов варьируется в интервале $0,21 \leq \Pi_t \leq 0,52$ при вариациях эффективной пористости $0,02 \leq \Pi_e \leq 0,42$. Анализ определений (1) позволяет допустить, что для наблюдаемых значений Π_e и Π_t могут иметь место следующие свойства:

$$\Pi_e \rightarrow \Pi_t \text{ при } \Pi_t \rightarrow 0+ \quad \text{и} \quad \Pi_e \rightarrow \Pi_{e,max} \text{ при } \Pi_t \rightarrow 1- \quad (2)$$

При этом ясно, что эффективная пористость не может превышать полной $\Pi_e \leq \Pi_{e,max} \leq \Pi_t$, а все они с учетом (2) будут удовлетворять неравенствам $0 \leq \Pi \leq 1$. В результате можно предположить, что зависимость $\Pi_e(\Pi_t)$ может быть аппроксимирована с помощью сигмоидной функции достаточно общего вида.

2. Логистическая аппроксимация эффективной пористости

Будем строить аппроксимацию эффективной Π_e от полной пористости Π_t на основе логистической функции вида:

$$\Pi_{ei} = b_0 / (1 + \exp(\Pi_{ti} - b_1)/b_2)) + \varepsilon_i, \quad (3)$$

где $\mathbf{b} = (b_0, b_1, b_2)$ — вектор параметров, оцениваемых нелинейным методом наименьших квадратов. Пример построения аппроксимации вида (3) для вектора параметров $\mathbf{b} = (0,3907; 0,2975; 0,0343)$ показан на рис. 2а утолщенной сплошной линией.

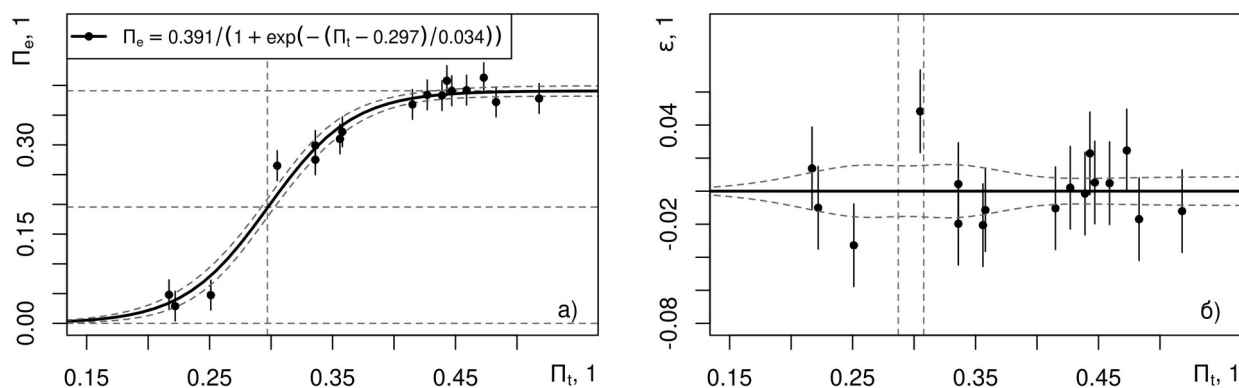


Рис. 2. Зависимость эффективной пористости Π_e от полной пористости Π_t : а) логистическая аппроксимация вида (3); б) отклонения логистической аппроксимации вида (3)

Горизонтальные штриховые линии на рис. 2а отображают характерные уровни эффективной пористости: а, б) $P_e = 0$ и $P_e = 0,3907$ — нижняя и верхняя горизонтальные асимптоты; в) $P_e = 0,1954$ — ордината точки перегиба графика функции (3). Вертикальная штриховая линия на рис. 2а отображает абсциссу точки перегиба графика функции (3).

3. Полученные результаты

При построении вышеуказанной аппроксимации в системе R был использован нелинейный метод наименьших квадратов, реализованный в рамках функции “`gsl_nls()`” из библиотеки “`gslnls`”, выпущенной под лицензией GNU GPL-3 для системы R [4]. Сводка основных результатов, полученных при построении аппроксимации в форме (3) для зависимости эффективной пористости P_e от полной пористости P_t приведена в листинге 1.

Листинг 1. Аппроксимация эмпирической зависимости $P_{ei}(P_{ti})$ в форме (3)

```
> summary(fit <- gsl_nls(Pie ~ b0/(1+exp(-(Pit-b1)/b2)),
+                        start=list(b0=0.4, b1=0.3, b2=0.1)))

Formula: Pie ~ b0/(1 + exp(-(Pit - b1)/b2))

Parameters:
      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
b0 0.390708    0.008252  47.346  < 2e-16 ***
b1 0.297472    0.004833  61.546  < 2e-16 ***
b2 0.034342    0.003853   8.913 3.81e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.02136 on 14 degrees of freedom

Number of iterations to convergence: 8
Achieved convergence tolerance: 8.288e-11

> confint(fit)
      2.5 %      97.5 %
1 0.3730085 0.40840696
2 0.2871054 0.30783833
3 0.0260780 0.04260644
```

Для более точной оценки качества полученной аппроксимации построим график отклонений модели $\epsilon_i(P_{ti})$, показанный на рис. 2б. Здесь утолщенная сплошная горизонтальная линия соответствует логистической аппроксимации вида (3), а близкие к нулевому урону штриховые линии — 0,95-доверительным интервалам прогнозируемых значений эффективной пористости P_e для исследуемых образцов пористого титана.

4. Заключение

В целом, качество построенной аппроксимации можно охарактеризовать как удовлетворительное. Несмотря на существенную дисперсию экспериментальных оценок, для подавляющего большинства точек эмпирическая и теоретическая интервальные оценки пересекаются. Единственный образец, для которого не наблюдается пересечение эмпирической и теоретической (прогнозируемой) интервальных оценок располагается в окрестности критического значения общей пористости $P_{tc} = 0,2975$, где вариации эффективной пористости образцов P_e достигают своего максимума.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 23-21-00376).

Литература

1. Плаченев Т.Г., Колосенцев С.Д. Порометрия. – Л.: Химия, 1988. – 174 с.
2. Москалев П.В. Перколяционное моделирование пористых структур. – М.: URSS, 2018. – 240 с. – URL: <https://elibrary.ru/zrjswd>.
3. Анциферов В.Н., Устинов В.С., Олесов Ю.Г. Спеченные сплавы на основе титана. – М.: Металлургия, 1984. – 168 с.
4. Chau J. gslnls: GSL Nonlinear Least-Squares Fitting. – R package version 1.1.2. – URL: <https://cran.r-project.org/package=gslnls>.