

**Максим Фаизович Гафаров^{1*}, Александр Николаевич Маковецкий²,
Константин Юрьевич Окишев³**

¹ Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

² Челябинский трубопрокатный завод ПАО «ТМК», г. Челябинск, Россия

³ Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*gafarovmax@yandex.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТРУБНЫХ СТАЛЕЙ ПОСЛЕ ТЕРМООБРАБОТКИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Исследована возможность построения моделей для прогнозирования количества микроструктурных составляющих в трубных сталях после проведения упрочняющей термообработки, твёрдости после закалки, а также твёрдости после отпуска. Важной частью работы являлся сбор и анализ исходных данных для моделирования. Основным источником данных являлись имеющиеся в литературе термокинетические диаграммы распада аустенита и кривые торцевой прокаливаемости. Кроме того, в работе проведён комплексный анализ значимости признаков и их сравнение с реальными физическими предпосылками.

Ключевые слова: термообработка сталей, математическое моделирование, трубные стали, машинное обучение.

Maxim F. Gafarov¹, Alexander N. Makovetskiy², Konstantin Yu. Okishev³

¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

² Chelyabinsk Pipe Rolling Plant of PJSC TMK, Chelyabinsk, Russia

³ Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia

MODELING OF MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF PIPE STEELS AFTER HEAT TREATMENT USING MACHINE LEARNING METHODS

The possibility of constructing models for predicting amounts of microstructural components in pipe steels after hardening heat treatment, as-quenched hardness, and hardness after tempering is investigated. An important part of the work was the collection and analysis of initial data for modeling. The main data source were CCT diagrams and Jominy hardenability curves available in the literature. In addition, a comprehensive analysis of the significance of the signs and their comparison with real physical prerequisites is carried out.

Keywords: heat treatment of steels, mathematical modeling, pipe steels, machine learning.

Важной задачей современного металловедения является математическое моделирование процессов термообработки. Несмотря на использование результатов многих экспериментальных исследований, по-прежнему не удаётся построить общую модель, с помощью которой можно было бы утверждать, что при заданных исходных условиях и параметрах режима термообработки будет получена та или иная структура и свойства стали. Процесс моделирования осложняется многообразием структур, режимов термообработки, а также химических составов сталей. В данной работе для решения подобной задачи использован метод машинного обучения.

Данные для построения моделей преимущественно были собраны из литературы путём анализа термокинетических диаграмм распада переохлаждённого аустенита и кривых прокаливаемости. Массив исходных данных условно может быть разделён на следующие группы:

1) данные для моделей прогнозирования механических свойств и микроструктуры после закалки (химический состав, твёрдость, скорости охлаждения, температуры нагрева, критические точки, критические скорости охлаждения, времена выдержек в аустенитной области, твёрдость после закалки, доли бейнита, мартенсита, перлита, феррита после охлаждения);

2) данные для моделей твёрдости после отпуска (химический состав, температура отпуска, время выдержки при отпуске, отпускная и закалочная твёрдости в выбранной точке образца прокаливаемости).

На этапе подготовки данных решались задачи: создание подходящего признакового пространства и генерация дополнительных данных с помощью метода грубых приближений. Поставленные задачи были решены совмещением полученных ранее эмпирических соотношений [1] с реальными данными и последовательным применением методов машинного обучения, а именно: DBSCAN [2] и t-SNE [3].

Для реализации моделей использовался язык программирования Python и модель LightGBM [4]. Результаты моделирования микроструктурных составляющих, а именно, доверительные интервалы и распределения ошибок представлены на рис. 1.

На рис. 2 представлена диаграмма рассеяния фактических и предсказанных значений твёрдости после закалки на образцах из валидационной выборки.

При этом 95 %-й доверительный интервал ошибки прогнозирования модели предсказания твёрдости после закалки на валидационной выборке составил (17, 28), HV. Помимо оценки ошибки прогнозирования переменной важно оценить адекватность модели по значимости признаков. График перестановочной значимости признаков представлен на рис. 3.

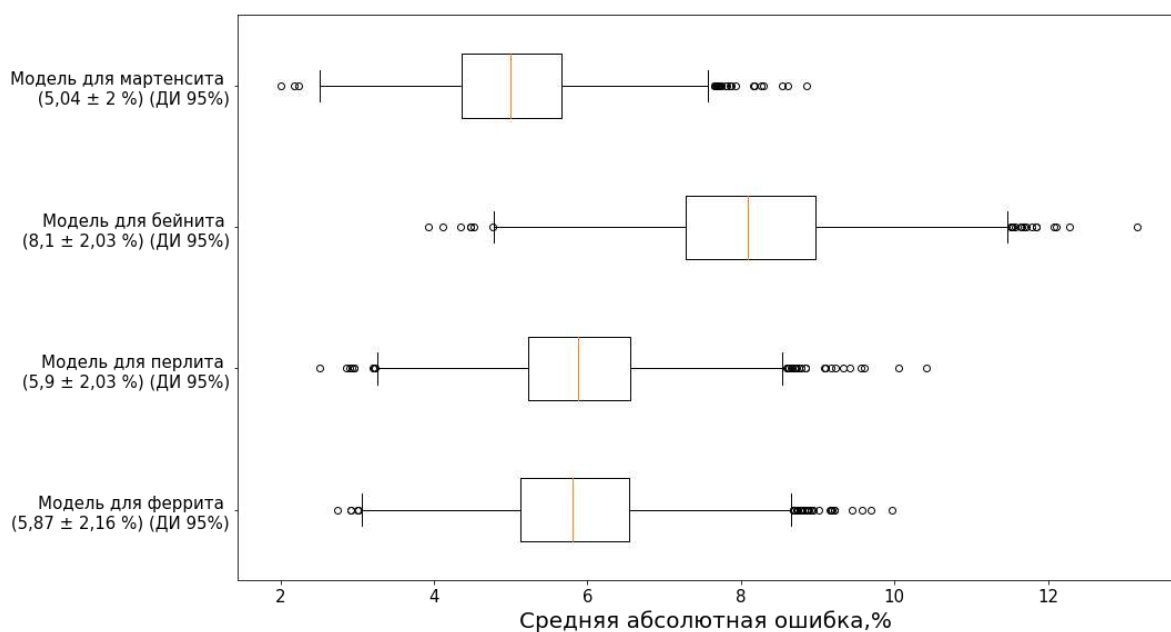


Рис. 1. Распределение ошибок на бутстрапированных валидных выборках.

Наиболее значимыми признаками являются скорость охлаждения, содержание основных легирующих элементов (C, Mn, Cr, Si), значение величины зерна. Полученный результат ожидаем, поскольку увеличение степени легирования аустенита приводит к повышению прочности, твёрдости получаемого после закалки мартенсита. Увеличение скорости охлаждения также способствует увеличению доли мартенсита (если до этого полной прокаливаемости не было) и повышению твёрдости сплава после термообработки. Кроме того, прокаливаемость стали напрямую зависит от величины зерна. Отсутствие температуры аустенитизации и времени выдержки среди наиболее значимых признаков объяснимо тем, что температура аустенитизации для большинства сталей в исходной выборке была типичной температурой нагрева под закалку ($A_{c3} + (50-70) ^\circ\text{C}$), а также небольшими временами выдержек. Кроме того, такие режимы термообработки не вызывали сильного роста зерна аустенита, поэтому сильные карбидообразующие элементы (Mo, V, Ti, Nb) также имеют невысокую значимость. Таким образом, значимость признаков модели предсказания соответствует металлургической теории.

На рис. 4 представлена диаграмма рассеяния прогнозных и фактических значений твёрдости после отпуска (различные типы отпуска).

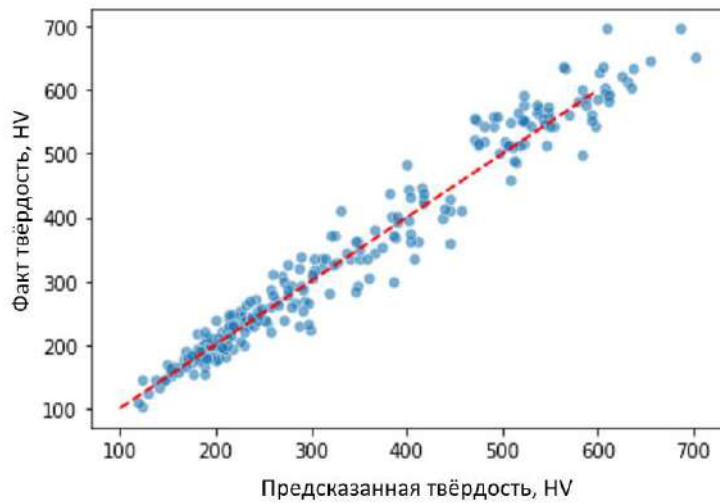


Рис. 2. График рассеяния фактических и предсказанных значений твёрдости на валидационной выборке

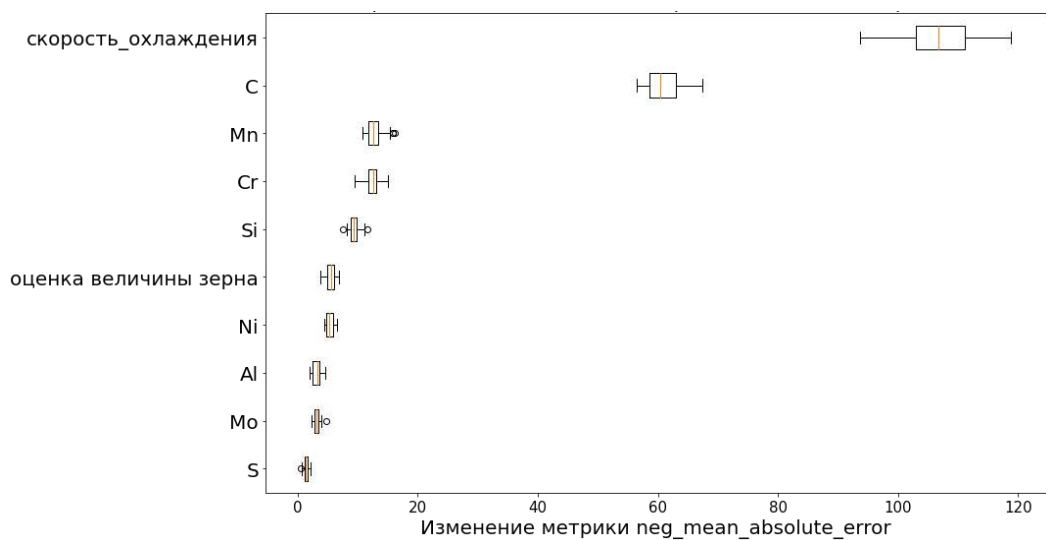


Рис. 3. Перестановочная значимость признаков для модели предсказания твёрдости

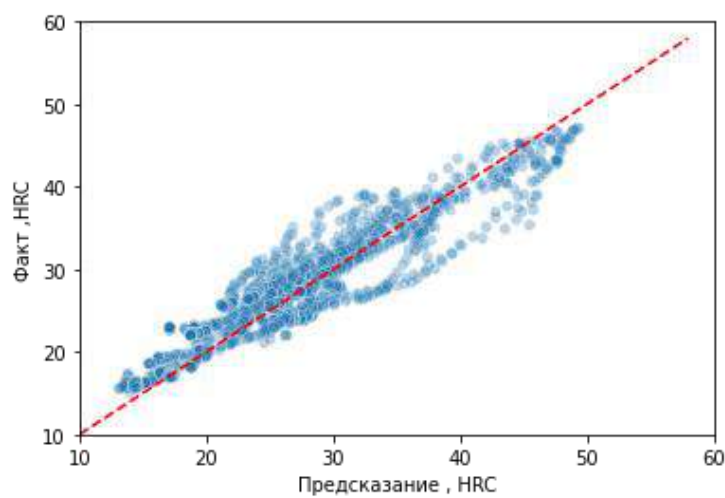


Рис. 4. Диаграмма рассеяния предсказанных и фактических значений твёрдости после отпуска

Средняя абсолютная ошибка определения твёрдости после отпуска находится в интервале (1,85 – 2,2) (95%). Однако стоит отметить наличие смещения в моделях прогнозирования твёрдости после отпуска для ряда марок сталей и температур отпуска. Это может быть объяснено небольшим размером выборки данных и недостаточной вариативностью химического состава сталей в выборке. Принимая во внимание причины ошибок на валидационной выборке, полученные результаты являются удовлетворительными.

В целом построенные модели имеют относительно низкий разброс, что при малой выборке данных и множестве различных источников является хорошим результатом. Значимость признаков, в особенности искусственно сгенерированных, является высокой, что при малых ошибках прогнозирования моделей, может подтверждать корректность результатов и выводов предыдущих работ. Применение адаптированного метода расширения выборки, предложенного в работе, позволило получить стабильную ошибку прогнозирования на всём диапазоне выбранных химических составов сталей.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Gafarov M. Predicting the hardness of pipe steels using machine learning methods / M. Gafarov, K. Okishev, A. Makovetskiy // 2022 International Conference on Industrial Engineering, Applications and Manufacturing (ICIEAM 2022). P. 1051–1056. DOI: 10.1109/ICIEAM54945.2022.9787169
2. Schubert E. DBSCAN revisited: Why and how you should (still) use DBSCAN / E. Schubert [et al.] // ACM Transactions on Database Systems (TODS). 2017. V. 42. P. 1–21. DOI: 10.1145/3068335
3. van der Maaten L. Visualizing data using t-SNE / L. van der Maaten, G. E. Hinton // Journal of Machine Learning Research. 2008. V. 9. P. 2579–2605.
4. [Electronic resource]: <https://lightgbm.readthedocs.io/en/stable/>

REFERENCES

1. Gafarov M., Okishev K., Makovetskiy A. Predicting the hardness of pipe steels using machine learning methods. // 2022 International Conference on Industrial Engineering, Applications and Manufacturing (ICIEAM 2022). P. 1051–1056. DOI: 10.1109/ICIEAM54945.2022.9787169
2. Schubert E. et al. DBSCAN revisited: Why and how you should (still) use DBSCAN. // ACM Transactions on Database Systems (TODS). 2017. V. 42. P. 1–21. DOI: 10.1145/3068335
3. van der Maaten L., Hinton G.E. Visualizing data using t-SNE. // Journal of Machine Learning Research. 2008. V. 9. P. 2579–2605.
4. [Electronic resource]: <https://lightgbm.readthedocs.io/en/stable/>