

УДК 669

А. Ю. Чудинов, А. Д. Новокрещенова

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина,
г. Екатеринбург

**d.v.gadeev@urfu.ru*

Научный руководитель – доц., канд. техн. наук *Д. В. Гадеев**

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК В СТАЛЯХ И СПЛАВАХ ТИТАНА

В работе рассмотрены примеры применения искусственных нейронных сетей для определения критических точек (A_{c1} , A_{c3} , M_n) в сталях и сплавах титана.

Ключевые слова: моделирование, нейронные сети, машинное обучение.

A. Yu. Chudinova, A. D. Novokreshhenova

NEURAL NETWORKS FOR DETERMINATION OF TRANSUS TEMPERATURE OF STEELS AND TITANIUM ALLOYS

The usage of artificial neural networks for critical temperature prediction of steels and titanium alloys is considered.

Keywords: modelling, artificial neural networks, machine learning.

Не секрет, что технологии искусственных нейронных сетей находят все большее применение в науке и индустрии, особенно в сфере информационных технологий. Однако, как показывает анализ публикаций в ведущих научных журналах, их применение активно растет и в материаловедении. В данной работе сделана попытка рассмотреть существующие нейросетевые модели, предназначенные для расчета критических температур и моделирования процессов при нагреве и охлаждении в сталях и сплавах титана.

Активный рост публикаций о применении нейронных сетей в материаловедении начался с конца 90-х годов [1]. В частности, уже в публикации 1996 года [2] было показано, что расчет температуры начала мартенситного превращения M_n с применением нейронной сети дает достаточно хорошую корреляцию с экспериментом. Более того, нейросетевая модель показала, что влияние углерода на значение температуры M_n значительно увеличивается с уменьшением содержания марганца в стали.

В развитии данной модели позднее авторами была сделана попытка моделирования кинетической диаграммы распада переохлажденного

аустенита в сталях [3]. Входными параметрами модели являлся химический состав стали, температура аустенитизации и скорость охлаждения. Как отмечают авторы, модель продемонстрировала большие ошибки, особенно при определении начала бейнитного превращения, что было связано с недостаточностью обучающих данных. Близкие результаты были также получены в работе [4] других авторов.

Несколько более высокую точность прогнозирования температуры M_n удалось достичь с помощью нейросетевой модели, описанной в [5–6]. Основным отличием этой модели являлось то, что авторам удалось ввести граничные условия для прогнозируемого значения M_n за счет моделирования не самой температуры, а функции от нее.

В работе [7] сравнивались результаты моделирования с помощью искусственных нейронных сетей температуры M_n и различных физических свойств, например, электросопротивления. Как было показано авторами, основной проблемой моделирования критических точек, в частности M_n , является низкое качество данных, на которых происходит обучение сети. В работе отмечается, что одинаковая архитектура на более качественной обучающей выборке показывает значительно более высокую точность.

Моделированию процессов распада переохлажденного аустенита в сталях при непрерывном охлаждении также была посвящена серия публикаций *L.A. Dobrzański* и *J. Trzaska* [8–10], в которых авторами было достигнуто значение коэффициента детерминации R^2 более 0,98 при проверке модели на тестовых данных.

В свою очередь, в работах [11–12] была решена обратная задача – моделирование с помощью нейронной сети процесса образования аустенита, т. е. необходимо было определить неравновесные температуры A_{c1} и A_{c3} при нагреве в зависимости от состава стали и скорости нагрева. В обеих работах были получены очень хорошие результаты, причем в работе Шульца с соавторами ошибка при моделировании обеих температур составила менее 1,5 %.

В сферу исследования титановых сплавов значительный вклад сделали работы Малинова и Ша с соавторами. Так, в работах [13–14] в 2000 году опубликовали результаты нейросетевого моделирования изотермического распада переохлажденной бета-фазы в титановых сплавах, а именно моделирования величины инкубационного периода при разных температурах. В работе авторы использовали три трехслойных нейронные сети, обучение которых проводилось на 189 обучающих примерах, из которых около 35 % являлись диаграммами двойных сплавов. Отдельные сети обучались, соответственно, на определение температуры минимальной устойчивости β -фазы («нос» диаграммы) и соответствующее значение инкубационного периода; значения инкубационного периода вне температуры минимальной устойчивости; определение температуры начала мартенситного превращения M_n . Обученные модели, как отмечают

авторы, характеризуются высокими показателями точности и соответствия экспериментальным данным. В качестве активационной функции в скрытом слое сети использовались сигмоидальная функция и гиперболический тангенс, их использование показало близкие значения точности прогнозирования.

Уже в 2005 году Гуо с коллегами [15] представили нейросетевую модель для расчета температуры полиморфного превращения титановых сплавов по данным химического состава. Для создания модели авторы использовали простую трехслойную нейронную сеть прямого распространения, обучение которой проводилось на 200 обучающих примерах. Как отмечается, в качестве входных данных для своей модели авторы использовали содержание Al, Cr, Fe, Mo, Sn, V, Zr и O, а влияние Na и Ni вследствие малого объема данных по сплавам, содержащим эти элементы, в обучающей выборке было учтено за счет подсчета молибденового эквивалента и передачи его значения в качестве дополнительного входного параметра. Для минимизации эффекта переобучения сети авторами применялась байесовская регуляризация [16], которая как показывает практика, дает хорошие результаты в регрессионных задачах. Модель, как отмечают авторы, дала хорошие показатели точности расчета в случае моделирования температуры полиморфного превращения многокомпонентных сплавов, однако в случае двойных систем термодинамическое моделирование в *Thermo-Calc* дает более точные результаты.

Обобщая рассмотренные выше примеры применения нейронных сетей для моделирования процессов в сталях и сплавах титана, можно отметить, что одним из основных требований получения высоких показателей точности является большой объем обучающей выборки. Кроме того, как показывает практика, благоприятный эффект на качество моделирования оказывает применение различных методов обобщения модели, например, путем использования байесовской регуляризации.

Работа выполнена при финансовой поддержке постановления № 211 Правительства Российской Федерации, контракт № 02.А03.21.0006, в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ, проект № 11.1465.2014/К

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. К. D. Н. Bhadeshia, ISIJ International 1999. Vol. 39, P. 966 .
2. Ironmaking and Steelmaking W. G. Vermeulen [et. al.], 1996. Vol. 23. P. 433–437
3. Steel W. G. Vermeulen [et. al.], 1997. Vol. 68. P. 72.
4. С. Capdevila, F. G. Caballero, and C. G. de Andrews, ISIJ International 2002. Vol. 42. P. 894

5. T. Sourmail and C. Garcia-Mateo, Computational Materials Science 2005. Vol. 34. P. 213.
6. T. Sourmail and C. Garcia-Mateo, Computational Materials Science 2005. Vol. 34. P. 323.
7. Computational Materials Science E. Béglise [et. al.], 2015. Vol. 98. P. 170.
8. L. A. Dobrzański and J. Trzaska. Journal of Materials Processing Technology 2004. Vol. 155–156. P. 1950.
9. L. A. Dobrzański and J. Trzaska. Computational Materials Science 2004. Vol. 30. P. 251.
10. L. A. Dobrzański and J. Trzaska, Journal of Materials Processing Technology 2004. Vol. 157–158. P. 107.
11. Mater. Sci. Technol. L. Gavard[et. al.], 1996. Vol. 12 P. 453.
12. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering P. Schulze [et. al.], 2016. Vol. 118. P. 12029.
13. S. Malinov, W. Sha, Z. Guo. Materials Science and Engineering: A 283, 1 (2000).
14. S. Malinov W. Sha. Materials Science and Engineering: A 2004. Vol. 365. P. 202.
15. Z. Guo, S. Malinov, W. Sha. Computational Materials Science 2005. Vol. 32. P. 1.
16. D. J. C. MacKay. Neural Computation 4, 1992. Vol. 4. P. 448.