

УДК 669.295; 544.022

DOI 10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276

оригинальное исследование

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ

О.Г. Климова – Корсмик¹, Д. Н. Клименко², М. В. Вережак², С. В. Жеребцов²

(Статья представлена членом редакционной коллегии А. В. Носковым)

¹Санкт-Петербургский государственный морской технический университет,
Санкт-Петербург, 198262, Россия

²Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, 308015, Россия

E-mail: klimenko@bsu.edu.ru, 1196573@bsu.edu.ru, zherebtsov@bsu.edu.ru

Аннотация. На базе данных из 153 сплавов с использованием подходов машинного обучения была обучена суррогатная модель для прогнозирования деформации до разрушения на сжатия высокоэнтропийных сплавов. В рамках работы оценивалась точность влияния архитектуры полносвязной искусственной нейронной сети (количество скрытых слоев и количество нейронов в скрытых слоях) на точность прогнозирования. Было показано, что с увеличением количества скрытых слоев абсолютная погрешность снижается – от 5,4% для односвязной нейронной сети до 4,8 % для двухслойной и 4,7% для трехслойной нейронной сети.

Ключевые слова: машинное обучение, высокоэнтропийные сплавы, пластичность, сжатие

Благодарности: Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения от «24» июня 2021г. № 075-11-2021-046 (ИГК 000000S407521QLP0002) с АО «ОЭЗ «ВладМиВа»» по комплексному проекту «Организация высокотехнологичного производства экспортноориентированных медицинских изделий на основе инновационных конструкционных материалов с целью импортозамещения на базе разработанных технологий» при участии НИУ «БелГУ» в части выполнения научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ с использованием оборудования Центра коллективного пользования "Технологии и Материалы НИУ "БелГУ". Работа частично выполнена (машинное время) при поддержке проекта Российского фонда фундаментальных исследований № 20-53-56063.

Для цитирования: Климова – Корсмик О. Г., Клименко Д. Н., Вережак М. В., Жеребцов С. В. 2022. Прогнозирование пластичности высокоэнтропийных сплавов. Прикладная математика & Физика, 54(4): 271–276.

DOI 10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276

PREDICTION OF THE PLASTICITY OF HIGH-ENTROPIC ALLOYS

O. G. Klimova – Korsmik¹, D. N. Klimenko², M.V. Verezhak², S.V. Zherebtsov²

(Article submitted by a member of the editorial board A. V. Noskov)

¹St. Petersburg State Marine Technical University,
St. Petersburg, 198262, Russia

²Belgorod National Research University,
Belgorod, 308015, Russia

E-mail: klimenko@bsu.edu.ru, 1196573@bsu.edu.ru, ozarov@bsu.edu.ru, zherebtsov@bsu.edu.ru

Received November, 30, 2022

Abstract. Based on a database of 153 alloys, a surrogate model was trained using machine learning approaches to predict compressive strain-to-fracture in high-entropy alloys. As part of the work, the accuracy of the impact of the architecture of a fully connected artificial neural network (the number of hidden layers and the number of neurons in hidden layers) on the prediction accuracy was evaluated. It was shown that with an increase in the number of hidden layers, the absolute error decreases - from 5.4% for a single-connected neural network to 4.8% for a two-layer and 4.7% for a three-layer neural network.

Keywords: Machine Learning, High-Entropy Alloys, Plasticity, Compression

Acknowledgements: The research was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation under an agreement dated June 24, 2021. No. 075-11-2021-046 (IGK 000000S407521QLP0002) with JSC "SEZ "VladMiVa" under the complex project "Organization of high-tech production of export-oriented medical devices based on innovative structural materials for the purpose of import substitution based on developed technologies" with the participation of NRU "BelGU" in part performing research, development and technological work using the equipment of the Center for Collective Use "Technologies and Materials of the National Research University" BelSU ". The work was partially performed (computer time) with the support of the Russian Foundation for Basic Research project No. 20-53-56063.

For citation: Klimova-Korsmik O., Klimenko D., Verezhak M., Zhrebtsov S. 2022. Prediction of the plasticity of high-entropic alloys. *Applied Mathematics & Physics*, 54(4): 271–276. (in Russian). DOI 10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276

1. Введение. Концепция высокоэнтропийных сплавов (ВЭСов) была первоначально предложена Йе [19] и Кантором [1]. В отличие от традиционных сплавов, которые образованы одним основным элементом и легирующими элементами, ВЭСы определяются как сплавы с пятью или более основными элементами в равном или почти равном атомном процентном соотношении (5–35 ат.%). ВЭСы вызвали большой исследовательский интерес [2]–[5], [10, 4] в связи с их высокой прочностью (в том числе при повышенных температурах), структурной стабильностью, твердостью и износостойкостью, а также хорошей стойкостью к коррозии и окислению [3, 4, 10]. Их превосходные свойства делают их перспективными для применения в широком спектре современных отраслей промышленности, например, в качестве высокотемпературных материалов аэрокосмических аппаратов следующего поколения.

Высокоэнтропийные сплавы обладают значительно большим композиционным пространством для проектирования новых сплавов по сравнению с традиционными сплавами. С одной стороны, огромное композиционное пространство дает более широкие возможности для получения сплавов с улучшенными свойствами. С другой стороны, разработка новых сплавов с желаемыми свойствами с помощью метода «проб и ошибок» может быть непрактичной. В связи с этим большое внимание уделяется разработке эффективных подходов для поиска сплавов с желаемыми характеристиками. Например, для прогнозирования фазового состава сплавов используются феноменологические правила [6, 13, 18], расчет фазовых диаграмм (CALPHAD) [12], алгоритмы машинного обучения [7, 20] и другие вычислительные методы, такие как *ab initio*, Монте-Карло (MC) или методом молекулярной динамики (МД) [8, 9]. Каждый из этих подходов имеет свои сильные и слабые стороны. Машинное обучение и аналитические модели (в первую очередь модели твердорастворного упрочнения) также показывают высокую точность в прогнозировании прочностных характеристик – предела текучести и микротвердости [11, 15, 17].

Например, *ab initio* и MD требуют очень много времени и вряд ли могут быть использованы для прогнозирования структуры сплавов высокопроизводительным способом. Феноменологические правила основаны на эмпирических наблюдениях и просты для расчетов, но точность их предсказаний не превышает 72% [6]. Моделирование CALPHAD может быть достаточно производительным, однако оно требует значительных вычислительных ресурсов. Кроме того, точность CALPHAD прогнозов может быть ограничена из-за отсутствия надежной базы данных для HEAs [12]. Подходы машинного обучения чувствительны к размеру и составу обучающего набора данных, но точность предсказания этого метода может достигать более 90% [17].

В рамках данной работы подходы машинного обучения были использованы для прогнозирования пластичности высокоэнтропийных сплавов.

2. Материал и методики. На основе литературных данных для данной работы была собрана база данных по пластичности высокоэнтропийных сплавов. В выборку включались данные по пластичности на сжатие при комнатной температуре сплавов в литом состоянии, так как такой набор условий позволяет сформировать наибольшую выборку, однородную по способу получения и испытания. В результирующую выборку вошли 153 сплава. Выборка случайным образом была разбита на обучающую и валидационную часть в пропорции 80/20 % соответственно.

В качестве признаков для обучения суррогатной модели были выбраны следующие 7 величин: δX_{Og} (разница в электроотрицательности по Оганову), \bar{C} (средний номер столбца в периодической таблице), \bar{X}_{abs} (средняя абсолютная электроотрицательность), dH_{mix} (энтальпия смешения), \bar{VA} (средний атомный объем), \bar{CNE} (средний эффективный ядерный заряд по Клементи), δRA (разница в атомных радиусах). Признаки были отобраны с использованием генетических алгоритмов как обеспечивающие наибольшую точность прогнозирования деформации до разрушения.

На рисунке 1 представлена схема полносвязной нейронной сети, использовавшейся для построения суррогатной модели. В рамках этой работы для подбора оптимальной архитектуры менялось количество скрытых слоев (1, 2 или 3 слоя) и количество нейронов в скрытых слоях (от 10 до 30 нейронов).

Для всех слоев, кроме выходного, использовалась функция активации Rectified Linear Unit (ReLU):

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{if } x < 0, \\ x, & \text{if } x \geq 0, \end{cases} \quad (1)$$

где x – входное значение, а $f(x)$ – выходное значение.

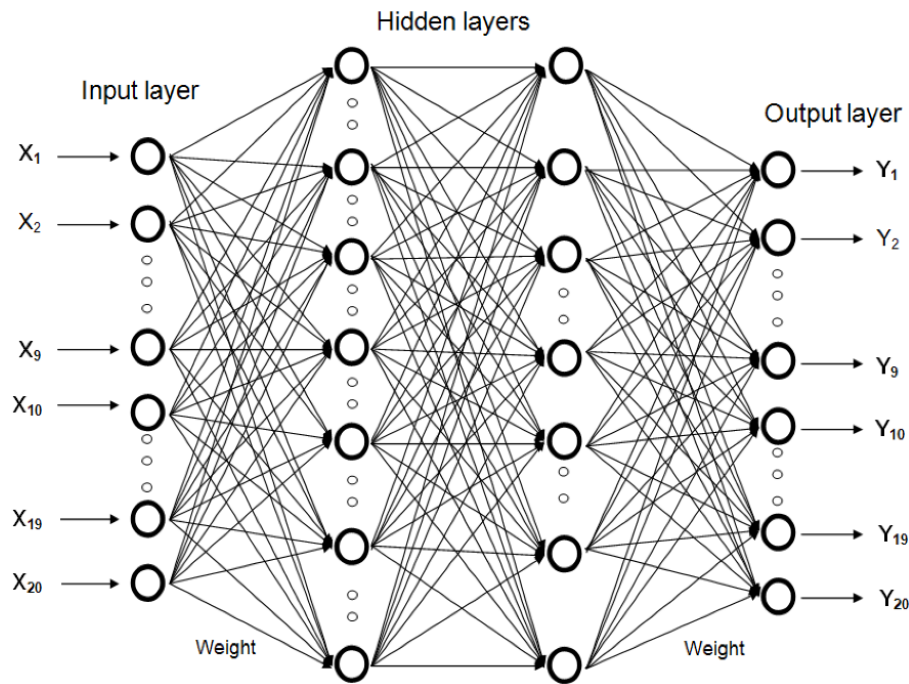


Рис. 1. Общая схема использованной полносвязной нейронной сети
 Fig. 1. General scheme of the used artificial fully connected neural network

Для выходного слоя использовалась сигмовидная функция активации:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}, \tag{2}$$

где x – входное значение, а $f(x)$ – выходное значение.

Для уменьшения переобучения и времени обучения искусственной нейронной сети использовались методы пакетной нормализации и отсева. Нормализация партии вычисляет среднее значение и стандартное отклонение каждой входной переменной для слоя на мини-партию и использует эту статистику для выполнения стандартизации – масштабирования данных, чтобы иметь среднее значение, равное нулю, и стандартное отклонение, равное единице. Техника отсева – это отключение случайных нейронов на основе заданной вероятности p , мы использовали $p = 0,5$.

В качестве функции потерь для расчета градиента использовалась бинарная кросс-энтропийная потеря (BSELoss):

$$BSELoss = -\frac{1}{N} \sum_i^N \sum_j^M \log(p_{ij}), \tag{3}$$

где N – количество записей в наборе данных, M – количество меток, $y_{ij} = \{0, 1\}$ – двоичный индикатор правильной классификации метки класса j в наблюдении i , p_{ij} – прогнозируемая вероятность класса j в наблюдении i .

Валидационный набор данных не использовался для обучения и использовался для оценки точности прогнозирования суррогатной модели. В ходе обучения для оценки точности прогнозирования использовалась 5-кратная перекрестная проверка, т. е. обучающий набор разбивался на 5 частей и на каждую эпоху обучения искусственной нейронной сети 4 из этих наборов (складок) использовались для обучения нейронной сети, а один оставшийся для проверки точности. На каждой эпохе обучения тренировочная складка менялась.

Каждая конфигурация нейронной сети обучалась в течении 500 эпох, на каждой эпохе обучения вычислялось среднеквадратичное отклонение на тестовой складке. Состояние с минимальной погрешностью запоминалось и в дальнейшем использовалось для вычислений. Для исключения влияния случайного распределения стартовых весов каждая конфигурация обучалась три раза, со случайной инициацией стартовых весов. Полученные после трех прогонов значения усреднялись.

3. Результаты и их обсуждение. В нашей работе мы использовали искусственные нейронные сети с 1, 2 и 3 скрытыми слоями, которые содержат либо одинаковое число нейронов в диапазоне от 10 до 30, либо неодинаковое случайное распределение (для сетей с 2 и 3 скрытыми слоями). На рисунке 2 представлены кривые обучения и зависимости предсказанных и истинных значений пластичности для конфигураций нейронных сетей, показавших наилучшую точность на валидационном наборе данных.

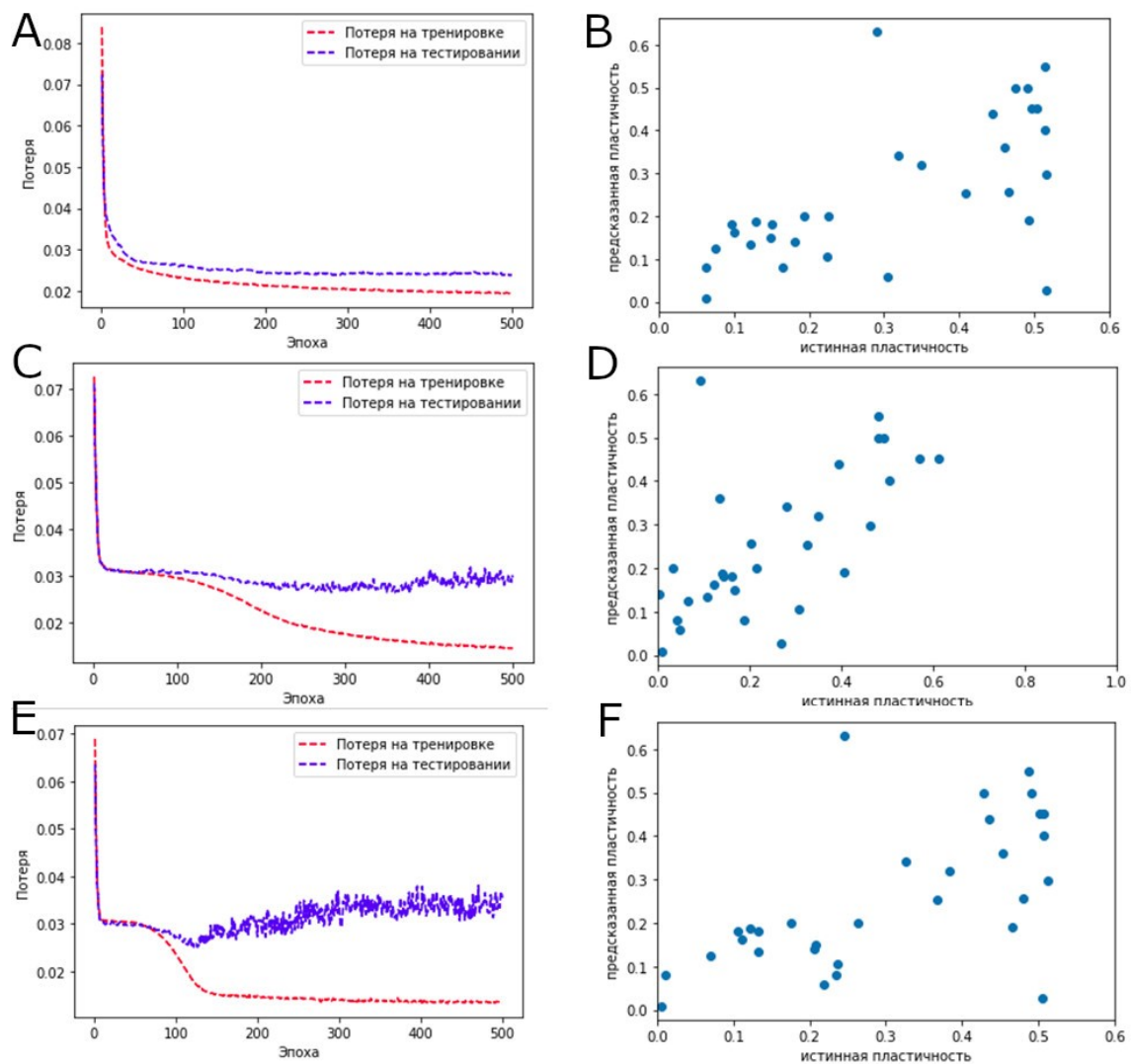


Рис. 2. Кривые обучения для одно- (А), двух- (С) и трехслойной (Е) нейронных сетей. Зависимость предсказанных и истинных значений пластичности для одно- (В), двух- (D) и трехслойной (F) нейронных сетей

Fig. 2. Learning curves for one- (A), two- (C) and three-layer (E) neural networks. Dependence of the predicted and true values of plasticity for one- (B), two- (D) and three-layer (F) neural networks

В таблице 1 приведены данные по среднеквадратичному отклонению в зависимости от количества скрытых слоев и количества нейронов в скрытых слоях. Видно, что с увеличением количества слоев точность незначительно повышается, при этом строгой зависимости между точностью и количеством нейронов в скрытых слоях не наблюдается. Для однослойной нейронной сети наилучшая точность наблюдается при 18 нейронах в скрытом слое. Архитектура сети с двумя скрытыми слоями достигает максимальной точности при числе нейронов в скрытых слоях по 14. Трехслойная нейронная сеть достигает наименьшей ошибки при прогнозировании пластичности сплавов при 10 нейронах в скрытых слоях.

Таблица 1. Среднеквадратичное отклонение для различных конфигураций нейронных сетей
Table 1. Standard deviation for various neural network configurations

Количество нейронов в скрытых слоях	10	14	18	22	28
1 скрытый слой	0.07	0.074	0.057	0.065	0.1
2 скрытых слоя	0.057	0.043	0.05	0.062	0.058
3 скрытых слоя	0.044	0.08	0.07	0.065	0.06

Для двух- и трехслойных нейронных сетей также оценивалась точность конфигураций с неодинаковым количеством нейронов в скрытых слоях. В таблице 2 приведены данные для нескольких сетей, конфигурации которых были выбраны случайным образом. Для случайных конфигураций с увеличением количества скрытых слоев среднеквадратичная ошибка уменьшается.

Таблица 2. Среднеквадратичное отклонение для двух- и трехслойных нейронных сетей со случайной конфигурацией

Table 2. Standard deviation for two- and three-layer neural networks with a random configuration

Конфигурация	10-20	15-18	30-11	25-16	18-10
Среднеквадратичное отклонение	0.048	0.066	0.05	0.048	0.082
Конфигурация	10-20-30	15-18-20	20-23-16	17-30-14	10-10-19
Среднеквадратичное отклонение	0.065	0.047	0.057	0.05	0.074

4. Заключение. Подходы машинного обучения были использованы для прогнозирования деформации до разрушения на сжатия при комнатной температуре для высокоэнтропийных сплавов. Было показано, что с увеличением числа скрытых слоев наблюдается уменьшение среднеквадратичной ошибки и для трехслойной нейронной сети была получена погрешность менее 5%. Была показана перспективность примененного подхода для прогнозирования пластичности высокоэнтропийных сплавов.

References

1. Cantor B. et al. 2004. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys, *Materials Science and Engineering: A.*, 375: 213–218.
2. Chuang M. H. et al. 2011. Microstructure and wear behavior of Al_xCo_{1-5x}CrFeNi_{1-5x}Ti_y high entropy alloys // *Acta Materialia*, 59(16): 6308–6317.
3. Gao Q. Zhang. 2008. Ultraviolet-B-induced oxidative stress and antioxidant defense system responses in ascorbate-deficient vtc1 mutants of *Arabidopsis thaliana*. *J Plant Physiol*, 165(2): 138–48.
4. Gludovatz B. et al. 2014. A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications // *Science*, 345(6201): 1153–1158.
5. Gorr B. et al. 2015. Phase equilibria, microstructure, and high temperature oxidation resistance of novel refractory high-entropy alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 624: 270–278.
6. Guo S. 2015. Phase selection rules for cast high entropy alloys: an overview. *Materials Science and Technology*, 31(10): 1223–1230.
7. Huang W., Martin P., Zhuang H. L. 2019. Machine-learning phase prediction of high-entropy alloys. *Acta Materialia*, 169: 225–236.
8. Jiang C., Uberuaga B. P. 2016. Efficient ab initio modeling of random multicomponent alloys. *Physical review letters*, 116(10): 105501.
9. Lederer Y. et al. 2018. The search for high entropy alloys: a high-throughput ab-initio approach. *Acta Materialia*, 159: 364–383.
10. Mishra B. et al. 2013. Experimental studies on the effect of size and shape of holes on damage and microstructure of high hardness armour steel plates under ballistic impact. *Materials & Design*, 43: 17–24.
11. Ramprasad R. et al. 2017. Machine learning in materials informatics: recent applications and prospects. *npj Computational Materials* 3.
12. Senkov O. N. et al. 2015. Accelerated exploration of multi-principal element alloys for structural applications. *Calphad*, 50: 32–48.
13. Sheng G. U. O., Liu C. T. 2011. Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase. *Progress in Natural Science: Materials International*, 21(6): 433–446.
14. Steurer W. 2020. Single-phase high-entropy alloys—A critical update. *Materials Characterization*, 162: 110179.
15. Toda-Caraballo I., Rivera-Del-Castillo P. E. J. 2015. Modelling solid solution hardening in high entropy alloys. *Acta Materialia*, 85: 14–23.

16. Tsai M. H., Yeh J. W. 2014. High-entropy alloys: a critical review. *Materials Research Letters*. 2(3): 107–123.
17. Wen C. et al. 2019. Machine learning assisted design of high entropy alloys with desired property. *Acta Materialia*, 170: 109–117.
18. Yang X., Zhang Y. 2012. Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multi-component alloys. *Materials Chemistry and Physics*, 132(2-3): 233–238.
19. Yeh J. W. et al. 2004. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced engineering materials*, 6(5): 299–303.
20. Zhang Y. et al. 2020. Phase prediction in high entropy alloys with a rational selection of materials descriptors and machine learning models. *Acta Materialia*, 185: 528–539.

Конфликт интересов: о потенциальном конфликте интересов не сообщалось.

Conflict of interest: no potential conflict of interest related to this article was reported.

Поступила в редакцию 11.10.2022

Поступила после рецензирования 17.11.2022

Принята к публикации 30.11.2022

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Климова – Корсмик Ольга Геннадьевна – начальник отдела исследований материалов, Институт лазерных и сварочных технологий, Санкт-Петербургский государственный морской технический университет (ИЛИСТ СПбГМТУ)

пр. Маршала Жукова, 38-а, Санкт-Петербург, 198262, Россия

Клименко Денис Николаевич – научный сотрудник лаборатории объёмных наноструктурных материалов, Белгородский государственный национальный исследовательский университет

ул. Победы, 85, г. Белгород, 308015, Россия

Вережак Михаил Викторович – магистрант института инженерных и цифровых технологий, Белгородский государственный национальный исследовательский университет

ул. Победы, 85, г. Белгород, 308015, Россия

Жеребцов Сергей Валерьевич – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории объёмных наноструктурных материалов, Белгородский государственный национальный исследовательский университет

ул. Победы, 85, г. Белгород, 308015, Россия

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Klimova-Korsmik Olga Gennadievna – Head of Materials Research Department, Institute of Laser and Welding Technologies, St. Petersburg State Marine Technical University Marshal Zhukov Ave., St. Petersburg, Russia

Klimenko Denis Nikolaevich – Junior Researcher, Laboratory of Bulk Nanostructural Materials, Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

Verezhak Mikhail Viktorovich – Graduate student, Institute of Engineering and Digital Technologies, Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

Zherebtsov Sergey Valerievich – PhD, Professor, Leading Researcher, Laboratory of Bulk Nanostructured Materials, Belgorod National Research University, Belgorod, Russia