

УДК 669.017+51-74

Применение машинного обучения для разработки сталей с оптимальными механическими свойствами

Трофимов Иван Сергеевич^(*)

trofimov.is@phystech.edu

Круглов Иван Александрович

ivan.kruglov@phystech.edu

МФТИ, Москва, Россия

Аннотация. Рассмотрен комплексный подход к созданию новых сталей для корпусов ядерных реакторов с использованием методов машинного обучения и эволюционной оптимизации. Представлено формирование обширной базы данных (294 состава, более 4000 записей), обучение моделей для прогноза предела текучести, длительной прочности и вязкости. Показано, что модели на основе градиентного бустинга обеспечивают наименьшие ошибки предсказаний. Разработанный эволюционный алгоритм позволил выявить пять новых сталей, обладающих улучшенными механическими характеристиками по сравнению с существующими промышленными аналогами. Синтез и экспериментальные испытания подтвердили корректность прогнозов.

Ключевые слова: машинное обучение, сталь, длительная прочность, вязкость, эволюционная оптимизация

Application of Machine Learning for the Development of Steels with Optimal Mechanical Properties

Trofimov Ivan Sergeevich^(*)

trofimov.is@phystech.edu

Kruglov Ivan Alexandrovich

ivan.kruglov@phystech.edu

MIPT, Moscow, Russia

Abstract. A comprehensive approach to the design of new steels for nuclear reactor vessels using machine learning and evolutionary optimization methods is presented. A large database was compiled (294 compositions, over 4000 records), and predictive models were trained for yield strength, long-term strength, and toughness. It was shown that gradient boosting models provide the lowest prediction errors. The developed evolutionary algorithm enabled the discovery of five new steels with superior mechanical characteristics compared to existing industrial analogues. Experimental synthesis and testing confirmed the accuracy of the model predictions.

Keywords: machine learning, steel, long-term strength, toughness, evolutionary optimization

Введение. Создание новых сталей с высокой прочностью и вязкостью является одной из ключевых задач материаловедения. Особенно актуально это для корпусов ядерных реакторов, работающих в условиях высоких температур и длительных нагрузок. Традиционный экспериментальный поиск композиций требует значительных ресурсов и не всегда эффективен. В работе

предложен метод, основанный на машинном обучении и эволюционной оптимизации, позволяющий ускорить процесс разработки и повысить вероятность нахождения материалов с целевыми свойствами. Научная значимость подхода заключается в реализации полного цикла разработки новых материалов: сбор базы данных, разработка моделей машинного обучения, оптимизация для нахождения новых материалов, экспериментальная верификация.

Материалы и методы. Для исследования была собрана база данных из 294 составов сталей с более чем 4000 записями, включающими химический состав, параметры термообработки и механические характеристики. В качестве признаков использовались как элементные концентрации, так и микроструктурные параметры, рассчитанные с помощью Thermo-Calc и предсказанные ML-моделями для узкого класса сталей.

Микроструктурные признаки включают концентрации и размеры различных карбидных фаз в сплавах, при этом их значения учитывают влияние режимов термообработки, что делает описание более информативным и точным.

Так как выполнение термодинамических расчетов заметно снижает скорость предсказаний, было реализовано промежуточное решение: обучение отдельных моделей для прогнозирования указанных микроструктурных параметров. В итоге процесс предсказания свойств стали строится следующим образом: исходные данные о химическом составе и параметрах термообработки подаются на вход, далее несколько регрессионных моделей определяют значения признаков ThermoCalc, а итоговая модель объединяет их с исходными данными и выдает прогноз целевого свойства.

Для прогнозирования применялись алгоритмы Lasso, Random Forest, Gradient Boosting (CatBoost), Kernel Ridge Regression. Качество моделей оценивалось по RMSE и коэффициенту детерминации R^2 с использованием k-fold и leave-one-out валидации. Для поиска оптимальных композиций разработан эволюционный алгоритм с операторами скрещивания, мутации, случайной генерации и сохранения лучших особей.

Результаты. Обученные модели показали высокую точность прогноза механических свойств, наилучшие результаты обеспечил градиентный бустинг (ошибки 61,8 МПа для предела текучести, 40,3 МПа для предела длительной прочности, 33,4 Дж/м² для ударной вязкости). Сравнение различных алгоритмов для всех целевых свойств представлено в табл. 1.

Для узкого класса сталей 10Cr-5Ni-Mo-V использование микроструктурных признаков дополнительно снизило ошибки. Также было показано, что подход, основанный на предсказании микроструктурных признаков не дает существенного ухудшения в качестве, однако существенно увеличивает скорость. Сравнение разных подходов представлено в табл. 2.

Эволюционная оптимизация позволила выделить пять новых составов (207E, 208E, 209E, 212E, 213E), обладающих превосходящими базу данных показателями прочности и вязкости. Они были экспериментально получены, а измеренные свойства провалидированы с предсказанием моделей машинного обучения. Сравнение представлено на рисунке.

Таблица 1

Сравнение разных алгоритмов

Модель	Целевое свойство	RMSE	R2-метрика
Линейная регрессия Lasso	Предел текучести	177,0 ± 12,5	0,628 ± 0,042
	Ударная вязкость	63,1 ± 2,5	0,478 ± 0,054
	Предел длительной прочности	56,5 ± 6,0	0,729 ± 0,012
Случайный лес	Предел текучести	74,3 ± 15,2	0,917 ± 0,027
	Ударная вязкость	35,2 ± 1,4	0,837 ± 0,020
	Предел длительной прочности	56,9 ± 10,0	0,704 ± 0,050
Градиентный бустинг	Предел текучести	61,8 ± 14,1	0,948 ± 0,012
	Ударная вязкость	33,4 ± 2,5	0,853 ± 0,040
	Предел длительной прочности	40,3 ± 7,4	0,860 ± 0,040

Таблица 2

Сравнение различных подходов для предсказания предела текучести с использованием микроструктурных признаков

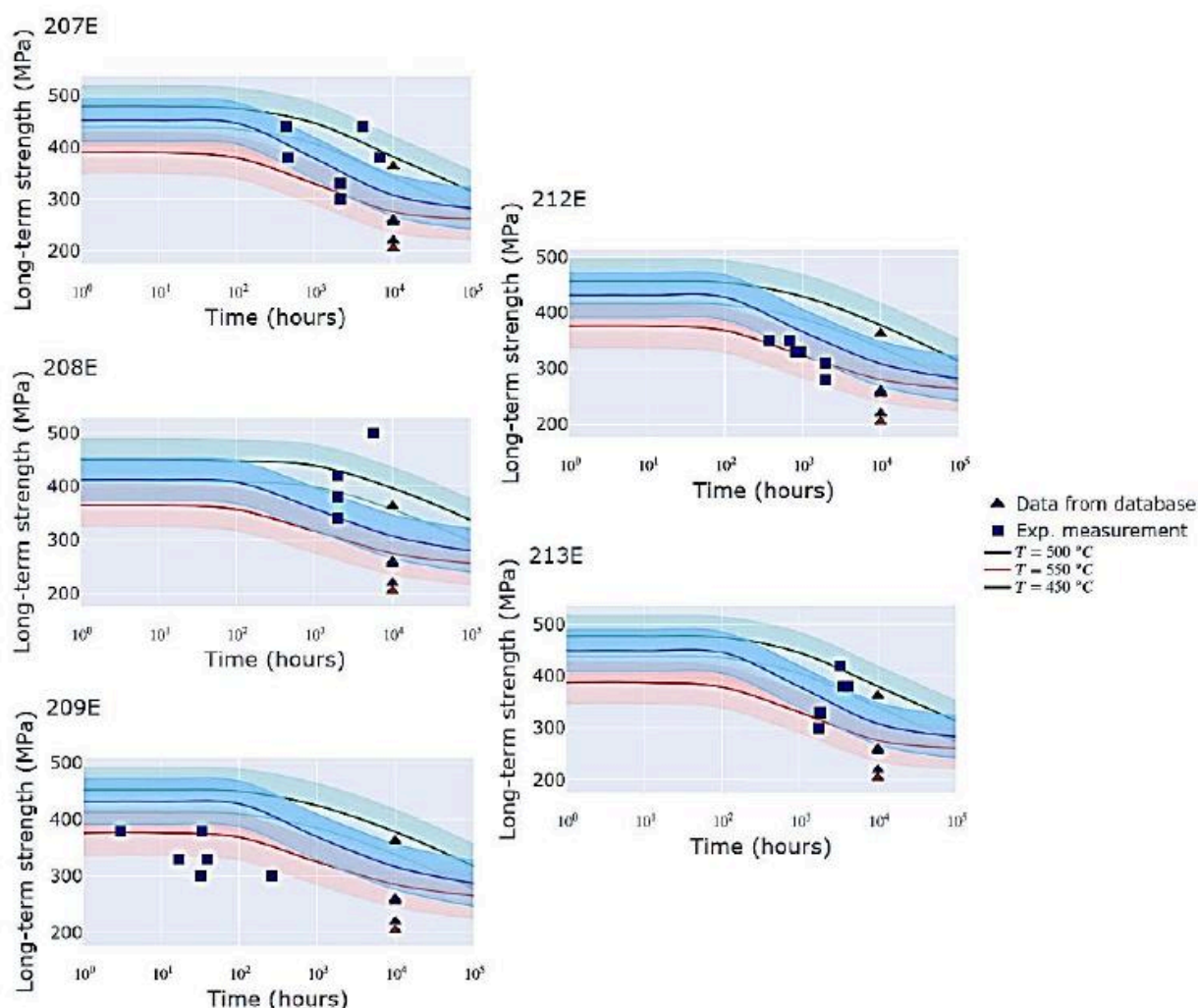
Подход	Предел текучести RMSE (МПа)
Composition + heat treatment	78,9 ± 10,9
Composition + heat treatment + ThermoCalc (true)	65,4 ± 9,3
ThermoCalc (true)	87,2 ± 11,3
Composition + heat treatment -> ThermoCalc	73,9 ± 11,4
Composition + heat treatment + ThermoCalc (pred)	65,6 ± 9,3

Обсуждение. Сравнение предсказанных и экспериментально измеренных характеристик показало хорошее совпадение для большинства новых сталей, что подтверждает корректность предложенного подхода. Для отдельных составов расхождения можно объяснить как ограниченностью исходных данных, так и технологическими погрешностями синтеза.

Важно отметить, что полученные результаты сопоставимы или превосходят достижения других авторов. В ряде исследований использовались классические алгоритмы машинного обучения, такие как линейная регрессия, SVM и случайный лес, однако они показывали ограниченную точность и зависимость от объема данных. В частности, Guo et al. [1] продемонстрировали, что случайный лес дает наименьшие ошибки для предсказания прочности и пластичности сталей, но требовал существенной ручной проработки признаков. В нашем случае применение градиентного бустинга и специально рассчитанных микроструктурных параметров позволило достичь еще более низких ошибок прогноза.

Аналогично, работы Xu et al. [2], где применялись глубокие нейронные сети, показали высокую точность, но из-за небольшого размера базы данных

модели были склонны к переоценке свойств новых материалов. Наш подход решает эту проблему за счет использования значительно более обширной базы (294 состава и свыше 4000 записей), что обеспечивает лучшую обобщающую способность.



Сравнение предела длительной прочности, рассчитанной с помощью модели машинного обучения (сплошные линии), и экспериментально измеренных значений (сплошные точки). Теневая область возле линий означает ошибки, заданные моделями ML. Треугольники указывают на данные о стали из базы данных при различных температурах, подчеркивая, что экспериментально расплавленные стали значительно превосходят данные из базы данных.

В отличие от исследований, где оптимизация ограничивалась поиском составов с высоким пределом текучести [3, 4], мы предложили комплексный критерий, включающий одновременно длительную прочность и вязкость. Такой многоцелевой поиск позволил обнаружить пять принципиально новых сталей, что подчеркивает преимущество интеграции машинного обучения с эволюционной оптимизацией.

Таким образом, наша работа расширяет существующие подходы, сочетая точность прогнозов с возможностью генерации новых промышленных материалов, что делает ее более применимой для задач атомной энергетики.

Заключение. Поставленная цель разработки сталей с улучшенными свойствами достигнута. Созданная методика сочетает машинное обучение, микроструктурное моделирование и эволюционную оптимизацию, что позволило выявить новые материалы для ядерной энергетики. Полученные результаты подтверждены экспериментально и показывают перспективность применения данного подхода для ускоренного проектирования сталей и других сплавов. Ожидается, что расширение базы данных и дальнейшее совершенствование моделей позволит адаптировать метод к широкому кругу материалов и промышленных задач.

Список источников

- [1] Guoa S., Yub J., Liuc X., Wang C., Jianga Q. A predicting model for properties of steel using the industrial big data based on machine learning. *Comput. Mater. Sci.*, 2019, pp. 95–104. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.056>
- [2] Xu X., Wang L., Zhu G., Zeng X. Predicting tensile properties of AZ31 magnesium alloys by machine learning. *JOM: the journal of the Minerals, Metals & Materials Society*, 2020, vol. 72 (11), pp 1–8. <https://doi.org/10.1007/s11837-020-04343-w>
- [3] Chunguang Shen et al. Physical metallurgy-guided machine learning and artificial intelligent design of ultrahigh-strength stainless steel. *Acta Mater.*, 2019, vol. 179, pp. 201–214. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.08.033>
- [4] Takahashi K., Tanaka Y. Material synthesis and design from first principle calculations and machine learning. *Comput. Mater. Sci.*, 2016, vol. 112, pp. 364–367. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.11.013>