



МЕТОД "MACHINE LEARNING" ПРИ СИНТЕЗЕ СПЛАВА NiTiHf

Чингиз Аббас оглы Имамализаде

Азербайджанский Государственный Университет Нефти и промышленности

E-mail: cimamelizade@gmail.com

Нитинол относится к перспективным функциональным материалам, использующимся в аэрокосмической, биотехнической, медицинской и других областях современных высоких технологий. Причиной этому является его уникальные технические свойства как эффект памяти формы и сверхэластичность. Эти свойства проявляются при фазовых превращениях. В данной работе методами машинного обучения (МО) приведены результаты исследования зависимости температуры перехода от условий обработки при синтезе сплава NiTiHf, являющегося модификацией нитинола и имеющего широкую область применения. Были применены такие машинные методы как GPR, SVM и Linear Regression. В качестве программного обеспечения была выбрана онлайн программа Jupyter Notebook которая создавалась на базе Python 3.9. Помимо обсуждения полученных результатов в работе внесены предложения по улучшению полученных результатов.

Ключевые слова: нитинол, машинное обучение, глубокое обучение, регрессия, программа Python

ВВЕДЕНИЕ

За последние 30 лет в области генерации данных материаловедение значительно продвинулось вперед. Полученные в результате данные собираются огромные банки данных [1-6]. Для эффективного управления и использования указанных данных был добавлен термин Big Data [7-10]. Машинное обучение (Machine learning) - это область науки, в которой разрабатываются различные регрессионные, классификационные или статистические алгоритмы в зависимости от заданной цели и данных. Машинное обучение (МО) работает с большими банками данными (Big data) и отвечает строгим требованиям ученых и инженеров в современном мире. Методы МО играют важную роль в решении актуальных задач в области материаловедения [11-15]. Одной из таких задач является синтез новых типов сплавов на основе нахождения эффективной зависимости между различными характеристиками сплавов. Например, МО используется для обнаружения и разработки сплавов с узким тепловым гистерезисом параллельно с оптимизацией теплового гистерезиса и температур перехода.

Методы машинного обучения состоят из 2 основных категорий: поверхностное обучение (ПО) и глубокое обучение (ГО). Методы ПО относятся к классическим методам машинного обучения и предназначены для работы с относительно небольшими объемами данных. Они включают такие алгоритмы, как линейная регрессия, логистическая регрессия, Random Forest, Support Vector Machine и регрессия гауссовского процесса [16-20]. Методы ГО относятся к методам, основанным на модифицированных искусственных нейронных сетях и предназначены для работы с крупномасштабными данными. К подобным методам относятся сверточная нейронная сеть (Convolutional Neural Network, CNN), рекуррентная нейронная сеть (Recurrent Neural Network, RNN), сеть глубокого убеждения (Deep Belief Network, DBN) [21-27].

Как известно, сплавы с эффектом памяти формы – это сплавы, способные восстанавливать свою первоначальную форму и размер при фазовом превращении [28, 29]. К наиболее распространенным подобным сплавам с памятью формы является нитинол (NiTi) и сплавы на его основе. Нитинол обладает двумя уникальными свойствами: тепловой памятью формы и сверхэластичностью, что делает его перспективным при разработке кардиотренажеров, микроактиваторов и в областях, связанных с демпфирующими инструментами [30-33]. Интерес к этому сплаву возник в еще в прошлом веке (1972 г.), когда Уильям Булер и Фредерик Ванг во время работы в военной лаборатории обнаружили эффект памяти формы в сплавах на основе NiTi [34, 35]. Механизмы эффекта памяти формы и сверхэластичности подробно описаны в [36].

В научной литературе обнаружено большое количество работ, посвященных синтезу и различным методам обработки нитинола и его сплавов методами МО [37-41]. Анализ указанных исследований позволяет сделать вывод, что наиболее важными характеристиками при синтезе нитинола

являются температура перехода и тепловой гистерезис. Многочисленные исследования [42-44], показывают, что на температуры перехода при синтезе нитинола влияет не только состав сплава, но и условия его обработки. Так, например, в работе [42] для синтеза NiTiHf в использовали регрессию процесса Гаусса. На первом этапе применялся метод Пирсона для нахождения корреляции между входными признаками и температурой [42]. Затем термический гистерезис и средние температуры перехода были предсказаны с более высокой точностью на основе структурных и технологических особенностей сплава, а затем подтверждены физико-информационным проектированием признаков. Авторы [43] получили высокие результаты при учете параметров обработки NiTiHf с использованием искусственной нейронной сети. В [43] отличие от предыдущей работы [42], большинство входных данных состояло из условий обработки, и в расчетах использовались только атомные проценты элементов в сплаве NiTiHf. Высокая точность была достигнута за счет использования нейронной сети в качестве алгоритма регрессии. Алгоритмы поверхностного обучения применялись для нахождения температур перехода NiTiHf в [44].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В данной работе классическими методами МО исследована зависимость температуры перехода от условий обработки в сплаве на основе нитинола. Расчеты проводились на онлайн-платформе Jupyter Notebook на базе Python 3.9.1. Для определения зависимости температуры перехода от параметров обработки данные были разделены на 70 % (обучающая выборка для расчета зависимости (train sample)) и 30 % (тестовая выборка для применения найденной зависимости (test sample)). Данные, используемые для запуска алгоритмов, взяты из [20].

Точность алгоритма определяется с помощью R^2 и MAE (mean absolute error-средняя абсолютная ошибка) [23, 43]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (1)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)}{n} \quad (2)$$

Здесь $\hat{y}_i$ - прогнозируемые данные, y_i - фактические данные, $\bar{y}$ - среднее значение фактических данных, i - количество данных, использованных в алгоритме.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На основе экспериментальных и прогнозируемых (ожидаемых) данных на рис. 1 представлены графические результаты алгоритмов регрессии, использованных в обучающей выборке, а на рис. 2 — графические результаты алгоритмов регрессии, использованных в тестовой выборке.

Линейная регрессия (Linear Regression) между условиями обработки и температурой перехода показывает $R^2 = 82,7\%$ точности и 21,54 К MAE для обучающей выборки и $R^2 = 67,8\%$ точности и 43,53 К MAE для тестовых данных (рис.1, а, рис. 2, а).

Регрессия процесса Гаусса (Gauss process regression) между условиями обработки и температурой перехода показывает $R^2 = 80,9\%$ точности и 21,82 К MAE для обучающей выборки и $R^2 = 78,7\%$ точности и 29,07 К MAE для тестовых данных (рис.1, б рис. 2, б).

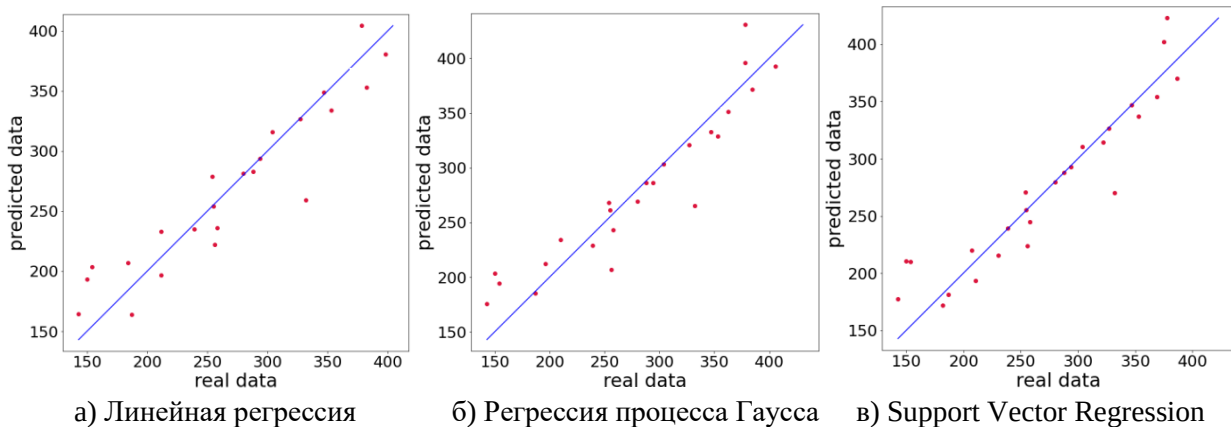


Рис. 1. Графики регрессии используемых алгоритмов (обучающая выборка)

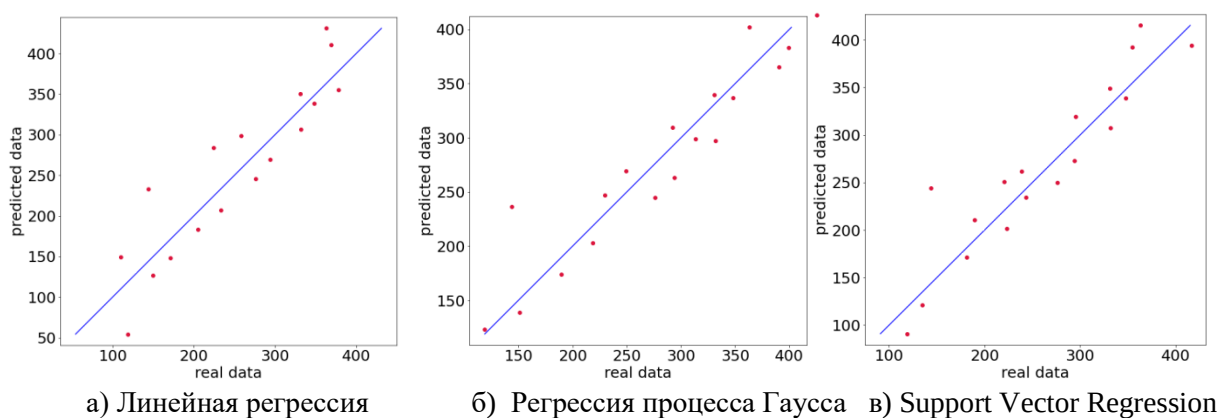


Рис. 2. Графики регрессии использованных алгоритмов (тестовая выборка)

SVM (Support vector machine) между условиями обработки и температурой перехода показывает точность $R^2 = 81,3\%$ и MAE 19,17 К для данных поезда и точность $R^2 = 73,8\%$ и MAE 35,97 К для тестовых данных. При регрессии использовалось линейное ядро из-за более высокой точности по сравнению с другими алгоритмами ядра (рис. 3, в). Рис. 4, в.

Из результатов вычислений видно, что более высокая точность в выборке поездов принадлежит линейной регрессии. Однако в тестовом образце точность снизилась с $R^2=82,7\%$ до $R^2=68,4\%$ и MAE с 21,54 К до 43,53 К, что является худшим результатом среди сравниваемых алгоритмов.

Подобно регрессии процесса Гаусса, SVM показывает почти одинаковую точность как в обучающей, так и в тестовой выборках $R^2 = 81,3\%$, 19,17 К MAE и $R^2 = 73,8\%$, 35,97 К MAE соответственно. Полученная более высокая точность с использованием линейного ядра подчеркивает, что и обучающая, и тестовая выборки могут быть линейно разделимы.

Регрессия процесса Гаусса показывает почти одинаковую точность как для обучающей ($R^2 = 80,9\%$, 21,82 К. MAE), так и для тестовой выборки ($R^2 = 78,7\%$, 35,97 К. MAE).

ВЫВОДЫ

В работе влияние условий обработки на температуру перехода сплава NiTiHf было исследовано с использованием методов машинного обучения (МО). В результате проведенного анализа полученных данных определено, что алгоритм регрессии процесса Гаусса предпочтительнее других. Полученные результаты могут быть использованы при изготовлении сплавов на основе NiTi, обладающих свойствами памяти формы и сверхэластичности. Кроме того, полученные результаты свидетельствуют о необходимости дальнейших исследований в этой области.



ЛИТЕРАТУРА

1. Packwood D. Machine Learning in Materials Chemistry: An Invitation / D. Packwood L.T.H. Nguyen, P.Cesana, G.Zhang et al. // Machine Learning with Applications, -2022, 8, - p. 100265-11.
2. Armiento R., Database-driven high-throughput calculations and machine learning models for materials design of Machine learning meets quantum physics, Lecture notes in Physics. (Eds. K.T. Schütt, S.Chmiela, O. A. von Lilienfeld, A. Tkatchenko, K. Tsuda, K-R. Müller), Springer, Cham, - 2020, 968, - 484 p.
3. Hein J. E. Machine Learning Made Easy for Optimal Reactions // Nature, -2021, 590, - p.40-41.
4. Schmidt J. Recent advances and applications of machine learning in solidstate materials science. / J.Schmidt, M.R. G. Marques, S.Botti and M A. L. Marques // Computational Materials,- 2019, 5, - p. 83.
5. Barta R.Machine learning from diverse data sources // Nature, 2021, -v..589, - pp.524-525.
6. Johnson N.S. Invited Review: Machine Learning for Materials Developments in Metals / N.S.Johnson, P.S.Vulimiri and A.C.To et al. // Additive Manufacturing, Additive Manufacturing, - 2020, 36, - p. 101641-101650.
7. Ripley B. D. Spatial Statistics, 1st ed., John Wiley & Sons, 1981.
8. Draxl, C. & Scheffler, M. nomad: The FAIR concept for big data-driven materials science. // MRS Bull., -2018, 43, -p. 676–682
9. Tanaka, I., Rajan, K. & Wolverton, C. Data-centric science for materials innovation. // MRS Bull. -2018, 43, - p. 659–663
10. Hastie, T. Tibshirani, R. & Friedman, J. H. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction, Springer, 2001
11. Ghiringhelli, L. M. Big data of materials science: Critical role of the descriptor. / L.M.Ghiringhelli, J. Vybiral, S.V.Levchenko, C.Draxl, M.Scheffler // Phys. Rev. Lett., -2015, 1145, - p.105503
12. Scabenberger O. and Gotway C.A. Statistical Methods for Spatial Data Analysis, CRC Texts in Statistical Science, Chapman and Hall, 2004.
13. Long C. J. Rapid structural mapping of ternary metallic alloy systems using the combinatorial approach and cluster analysis / C.J.Long, J. Hatrick-Simpers, M. Murakami et al. // Review of Scientific Instruments, - 2007, 78, - p. 072217-9 2007.
14. Long C. J. Rapid identification of structural phases in combinatorial thin-film libraries using x-ray diffraction and non-negative matrix factorization. / C.J.Long, D. Bunker, X. Li et al. // Review of Scientific Instruments, - 2009, 80, -p. 103902-11.
15. Li, Y. & Guo, W. Machine-learning model for predicting phase formations of high-entropy alloys. // Phys. Rev. Mater. -2019, - p. 095005.
16. Xiong, J. A machine-learning approach to predicting and understanding the properties of amorphous metallic alloys. / J.A.Xiong, S.-Q. Shi, T.-Y. Zhang //Mater. Des. , -2020, 187, -p.108378
17. Ward, L. A machine learning approach for engineering bulk metallic glass alloys. // Acta Mater, - 2018, 159, - p.102–111 .
18. Ren, F. Accelerated discovery of metallic glasses through iteration of machine learning and high-throughput experiments. / F.Fen, L.Ward, T.Willams et al. // Sci. Adv., -2018, 4, - p. 1566
19. Ward, L., Agrawal, A., Choudhary, A. & Wolverton, C. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. NPJ Comput. Mater. 2, 16028, 2016.
20. Kusne A. G., On-the-fly machine-learning for high-throughput experiments: search for rare-earth-free permanent magnets / A.G.Kusne, T. Gao, A. Mehta et al. // Scientific Reports, - 2015, 4, - p.6367-6373.
21. Wei J. Machine learning in materials science / J.Wei, X. Chu, X. Y. Sun // InfoMat, -2019, No.1, - p.338–358



22. Agrawal A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. / A., Agrawal, A.Choudhary // *APL Materials*, - 2016, 4, - p.053208-1053208-11.
23. Xue D., An informatics approach to transformation temperatures of NiTi-based shape memory alloys / D.Xue, R.Yuan, Y. Zhou et al. // *Acta Materialia*, -2017, 125, -p.532-541.
24. Baldi P. Deep learning in biomedical data science. // *Ann. Rev. Biomed. Data Sci.*, -2018, - No.1, -p. 181–205.
25. Ward L. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. / L.Ward, A.Agrawal, A.Choudhary, C. Wolverton // *NPJ Comput. Mater.*, -2016, 2, - p.16028
26. Wainberg M. Deep learning in biomedicine. / M.Wainberg, D.Merico, A.Delong, B.J Frey, // *Nature biotechnology*, - 2018, 36, No. 9, -p. 829-838.
27. Buehler W.J. Effect of low-temperature phase changes on the mechanical properties of alloys near composition TiNi. / W.J.Buehler, J.V.Gilfrich, R.C.Wiley // *Appl Phys*, 1963, 34, -p.1475–7.
28. Tadaki T. Shape memory alloys. / T.Tadaki, K. Otsuka, K. Shimizu // *Ann. Rev. Mater. Sci.*, - 1988, 8, -p. 25-45
29. Vaidyanathan R. Shape-Memory Alloys. *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. 2002, - p. 1-13
30. Kauffman G. B., Mayo. I. The Story of Nitinol: The Serendipitous Discovery of the Memory Metal and Its Applications // *The chemical education*, -1996, 2, No.2, - p. 1-21.
31. Solomou A. Multi-objective Bayesian materials discovery: Application on the discovery of precipitation strengthened NiTi shape memory alloys through micromechanical modeling. / A. Solomou, Zhao G et al. // *Mater. Des.* - 2018, 160, -p.810–827
32. Wadood A. Brief Overview on Nitinol as Biomaterial // *Advances in Materials Science and Engineering*, - 2016.
33. Mahmoudi, M. On the printability and transformation behavior of nickel-titanium shape memory alloys fabricated using laser powder-bed fusion additive manufacturing. / M.Mahmoudi, G.Tapia, B.Franco // *J. Manuf. Process.*, - 2018, 35, -p.672–680.
34. Novák P. Preparation of nitinol by non-conventional powder metallurgy techniques. / P.Novák, H. Moravec, P. Salvetti et al. // *Materials Science and Technology*, - 2015, 31, No.15, - p.1886-1893.
35. Mohd J.J. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. / J.J., Mohd, M.Leary, A.Subic, M.A.Gibson // *Mater Design*, - 2014, No. 56, -p. 1078–1113.
36. Sehitoglu H. Superelasticity and Shape Memory Behavior of NiTiHf Alloys / H.Sehitoglu, Y. Wu1, L. Patriarca et al. // *Shap. Mem. Superelasticity*, - 2017, No. 3, -p.168–187.
37. Mehrpouya M., The prediction model for additively manufacturing of NiTiHf high-temperature shape memory alloy / M.Mehrpouya, A.Gisario, M.Nematollahi et al. // *Materials Today Communications*, - 2021, 26, - p.102022-8.
38. Song W.J. Prediction and Comparison of Electrochemical Machining on Shape Memory Alloy (SMA) using Deep Neural Network (DNN) / W.J.Song, S.G.Choi, and E-S. Lee // *J. Electrochem. Sci. Technol.*, - 2019, 10, No.3, - p. 1-8.
39. Mwangia J.W. Nitinol manufacturing and micromachining: A review of processes and their suitability in processing medical-grade nitinol. / J.W.Mwangia, L.T. Nguyen, V. D. Buia et al. // *Journal of Manufacturing Processes*, - 2019, No. 38, -p. 355–369.
40. Nematollahi M. Additive Manufacturing of Ni-Rich NiTiHf20: Manufacturability, Composition, Density, and Transformation Behavior / M.Nematollahi, G. Toker, S. E. Saghayan. // *Shape Memory and Superelasticity*, -2019, 5, No.5, -p.113-124.
41. Kapoor D. Nitinol for medical applications: a brief introduction to the properties and processing of nickel titanium shape memory alloys and their use in stents. // *Johnson Matthey Technol Rev*, - 2017, 61, No.1, -p.66-76.



42. Hodgson D. and Russell S. Nitinol melting, manufacture and fabrication. // Min Invas Ther & Allied Technol., - 2000, 9, No.2, -p. 61- 66.
43. Liu S. Physics-informed machine learning for composition –process –property design: Shape memory alloy demonstration / S.Liu, B. B. Kappes, B. A. Ahmadi. // Applied Materials Today, - 2021, 22, -p.100898.
44. Abedi H. Neural Network Modeling of NiTiHf Shape Memory Alloy Transformation Temperatures / H.Abedi, K.S. Baghbaderani, A. Alafghani // Research Square, -2021, - p.1-29.

NİTiHf ƏRİNTİSİNİN SİNTEZİ ÜÇÜN "MAŞIN ÖYRƏNMƏSİ" ÜSULU

Ç.A. İmaməlizadə

Nitinol aerokosmik, biotexniki, tibbi və müasir yüksək texnologiyanın digər sahələrində istifadə olunan perspektivli funksional materialdır. Bunun səbəbi nitinolun forma yaddaş effekti və super elastiklik kimi unikal texniki xüsusiyyətləridir. Bu xüsusiyyətlər faza çevrilmələri zamanı özünü göstərir. Təqdim olunan məqalədə biz maşın öyrənməsi (ML) metodlarından istifadə edərək, nitinolun modifikasiyası olan və geniş tətbiq sahəsinə malik NiTiHf ərintisi sintezi zamanı keçid temperaturunun emal şəraitindən asılılığının öyrənilməsinin nəticələrini təqdim edirik. GPR, SVM və Linear Regression kimi maşın üsulları tətbiq edilmişdir. Proqram təminatı kimi Python 3.9 əsasında yaradılmış Jupyter Notebook onlayn proqramı seçilmişdir. Əldə edilmiş nəticələri müzakirə etməklə yanaşı, məqalədə əldə edilmiş nəticələrin təkmilləşdirilməsi üçün təkliflər verilir.

Açar sözlər: *nitinol, maşın öyrənməsi, dərin öyrənmə, reqressiya, python proqramı*

"MACHINE LEARNING" METHOD FOR THE SYNTHESIS OF A NiTiHf ALLOY

Ch.A. Imamalizade

Nitinol is a promising functional material used in aerospace, biotechnical, medical and other areas of modern high technology. The reason for this is its unique technical properties such as shape memory effect and superelasticity. These properties are manifested during phase transformations. In this paper, using machine learning (ML) methods, we present the results of studying the dependence of the transition temperature on processing conditions during the synthesis of the NiTiHf alloy, which is a modification of nitinol and has a wide range of applications. Machine methods such as GPR, SVM and Linear Regression have been applied. The online program Jupyter Notebook, which was created based on Python 3.9, was chosen as the software. In addition to discussing the results obtained, the paper makes suggestions for improving the results obtained.

Keywords: *nitinol, machine learning, deep learning, regression, Python program*