

Sestavení modelu deformačního odporu za tepla pomocí umělých neuronových sítí a konstitutivních vztahů

Creation of Hot Flow Stress Model Utilizing Artificial Neural Networks and Constitutive Relationships

Ing. Petr Opěla, Ph.D.; Ing. Petr Kawulok, Ph.D.; Ing. Rostislav Kawulok, Ph.D.; Ing. Stanislav Ruzs, Ph.D.; Ing. Vojtěch Ševčák

VŠB – Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Regionální materiálově technologické výzkumné centrum, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba, Česká republika

Matematické modely, popisující vývoj přirozeného deformačního odporu při tváření za tepla ve vztahu k měnícím se termomechanickým podmínkám, hrají klíčovou úlohu například při nasazení MKP (metoda konečných prvků) simulačních softwarů. Tyto modely obvykle zahrnují parametry (pomocné proměnné), které jsou na termomechanických podmínkách závislé. Možnosti predikce parametrů dvou takových modelů jsou zde diskutovány. Popisovanými parametry jsou: píková deformace, píkové napětí, exponent zpevnění a exponent odpevnění. Celkem jsou diskutovány tři možnosti – predikce parametrů na základě funkčních předpisů ve vztahu k Zenerovu-Hollomonovu parametru, dále predikce na základě funkčního předpisu, jenž nevyužívá Zenerův-Hollomonův parametr, a predikce na základě využití umělých neuronových sítí. Metoda neuronových sítí byla ve většině případů shledána jako nejpřesnější. Výjimkou je predikce píkového napětí.

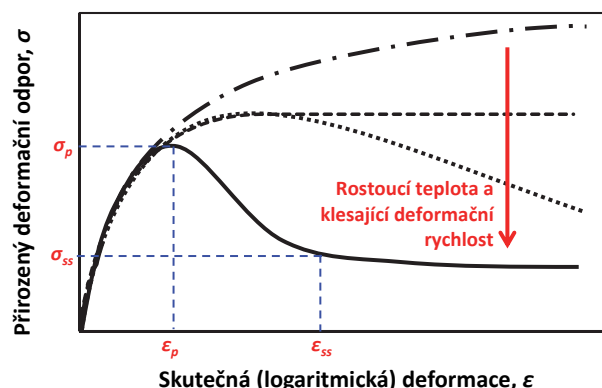
Klíčová slova: popis napěťových křivek za tepla; regresní analýza; umělé neuronové sítě

Natural flow stress of formed (rolled, forged, etc.) material is a key material characteristic. Knowledge of its development under various thermomechanical conditions (i.e. strains, strain rates, temperatures) is useful for designing a particular forming process – nowadays by use of FEM (finite element method) based software. In the case of a newly introduced material, the so-called flow curves are experimentally compiled. These curves can be compiled on the basis of experimental data usually obtained by uniaxial compression or torsion tests under different thermomechanical conditions. For use these curves in FEM software it is appropriate to describe them mathematically (for the purpose of their predictions). Various types of flow stress models were derived for this purpose. A lot of these models contain parameters (auxiliary variables), which are dependent on the magnitude of strain rate and temperature. Different approaches can be then used to calculate these parameters under the above mentioned thermomechanical conditions. One methodology uses the known constitutive relationships, which can be treated by regression methods. These relationships usually relate the examined parameters to the well-known Zener-Hollomon parameter (connecting the mutual effect of temperature and strain rate). The relationships of not utilizing the Zener-Hollomon parameter also exist. Another (often more reliable) approach is to use intelligent algorithms, such as artificial neural networks (ANN). In this work, experimental flow curves of 38MnVS6 steel were used to compare reliability of these methods. Two flow stress models were used – Cingara & McQueen (describing flow curves up to the peak point) and Opěla-Schindler (describing flow curves beyond the peak point). The examined parameters of these models are peak strain, peak stress, hardening exponent and softening exponent. The obtained findings indicated that an ANN approach can provide the best results in most cases. In the case of the peak stress prediction, however, it is still more reliable to use the known constitutive relationships.

Key words: hot flow curve description; regression analysis; artificial neural networks

Znalost vývoje přirozeného deformačního odporu (PDO) během objemového tváření (válcování, kování atp.) materiálů za různých termomechanických podmínek (stupňů deformací, deformačních rychlostí, teplot) hraje klíčovou roli například při počítačových simulacích tvářecích procesů s nasazením FEM (finite element method, čili MKP – metoda konečných prvků) simulačních softwarů [1, 2]. Přirozený deformační odpor lze vyjádřit (v závislosti na výše zmíněných

termomechanických podmínkách) v podobě tzv. napěťových křivek (obr. 1). Napěťové křivky jsou pro nově zaváděný materiál obvykle sestavovány na základě experimentálních dat. Potřebná experimentální data jsou běžně získávána ze série jednoosých zkoušek tlakem, či zkoušek krutem. Pro potřeby MKP simulací je vhodné takto získané křivky popsat matematicky. Za tímto účelem bylo odvozeno velké množství různých tzv. modelů deformačního odporu [1].



Obr. 1 Schématické znázornění napětových křivek [5]

Fig. 1 Schematic representation of flow curves [5]

Mnoho těchto modelů obsahuje parametry (pomocné proměnné), které jsou závislé na velikosti teploty a deformáční rychlosti (například souřadnice napětového píku – ε_p , σ_p , nebo počátku ustáleného stavu – ε_{ss} , σ_{ss} (obr. 1). K výpočtu těchto parametrů za výše uvedených termomechanických podmínek pak lze využít různé přístupy. Jednou z možností je využití odvozených konstitutivních vztahů, které vyjadřují funkční závislost hledaného parametru k termomechanickým podmínkám. Tyto vztahy vyžadují stanovení materiálových konstant (řešeno metodami regresní analýzy při znalosti experimentálních dat) [2]. Další, často přesnější metodou je využití inteligentních algoritmů, např. GA (genetic algorithm) – genetické algoritmy nebo ANN (artificial neural networks) – umělé neuronové sítě (UNS) [3]. Cílem tohoto příspěvku je porovnat přesnost výstupů odvozených konstitutivních vztahů s výstupy algoritmů UNS při predikci parametrů dvou modelů PDO, společně popisujících napětové křivky před a za hodnotou napětového píku.

1. Experimentální materiál

Pro účely srovnání přesnosti mezi představovanými metodami výpočtu parametrů modelů PDO byla vybrána sada dvaceti experimentálních napětových křivek oceli 38MnVS6. Tato sada byla sestavena na základě experimentálních dat získaných sérií jednoosých zkoušek tlakem za tepla. Zkoušky byly realizovány za těchto termomechanických podmínek: teploty deformace (1553 K, 1473 K, 1373 K, 1273 K a 1123 K), deformáční rychlosti ($0,1 \text{ s}^{-1}$, 1 s^{-1} , 10 s^{-1} a 100 s^{-1}) a hodnoty skutečné deformace až do 1,0. Výsledkem každé zkoušky je tedy jedna napětová křivka (tj. závislost $\sigma - \varepsilon$), odpovídající jedné kombinaci teploty a deformáční rychlosti (obr. 1). Konkrétní experimentální postup byl již dříve detailně popsán v [4].

2. Modely deformáčního odporu za tepla

Napětové křivky, reprezentující vývoj PDO za tepla vykazují s ohledem na aplikované termomechanické podmínky tvarovou rozmanitost (obr. 1) [5]. Tyto křivky lze popsat v širokém intervalu termo-mechanických podmínek (tj. stupňů deformací, deformáčních rychlostí a teplot deformace) s využitím různých matematických modelů [1]. A. Cingara a H. J. McQueen [6] navrhli jeden z nejpřesnějších modelů, umožňujících popis napětových křivek po napětovém píku, viz rov. (1). Modifikovaný model Cingara & McQueen, navržený P. Opělou a I. Schindlerem [4] pak umožňuje popis napětových křivek za píkem, viz rov. (2):

$$\sigma = \sigma_p \cdot \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \cdot \exp \left(1 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \right) \right]^c \quad (1)$$

$$\sigma = \sigma_{ss} + (\sigma_p - \sigma_{ss}) \cdot \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \cdot \exp \left(1 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \right) \right]^s \quad (2)$$

Závisle proměnná σ (MPa) představuje přirozený deformáční odpor a ε (-) je skutečná (logaritmická) deformace. Souřadnice napětového píku jsou dány píkovou deformací, ε_p (-), a napětím, σ_p (MPa). Parametr σ_{ss} (MPa) představuje napětí na ustáleném plastickém toku (Steady-State). Parametry c (-) a s (-) reprezentují exponent zpevnění, respektive odpevnění [4, 6].

3. Predikce parametrů v modelech PDO

Modely vyjádřené rov. (1) a (2) obsahují několik parametrů, které je nutno popsat ve vztahu k teplotě a deformáční rychlosti. Těmito parametry jsou ε_p , σ_p , σ_{ss} , c a s . Za předpokladu, že hodnoty parametru σ_{ss} jsou často vztahovány k hodnotám parametru σ_p , tj. $\sigma_{ss} = f(\sigma_p)$, zbývají k určení čtyři parametry (ε_p , σ_p , c a s). V tomto příspěvku budou diskutovány dva rozdílné přístupy, umožňující jejich predikci. První přístup je založen na využívání různých konstitutivních vztahů. Druhý přístup je zaměřen na využití umělých neuronových sítí (UNS).

Každá z výše diskutovaných metod však vyžaduje experimentálně získaná data (experimentální hodnoty hledaných parametrů). V první řadě je tedy nutno stanovit experimentální hodnoty ε_p , σ_p , c a s . Experimentální hodnoty souřadnic napětového píku, tj. ε_p a σ_p , lze pro každou kombinaci teploty a deformáční rychlosti získat odečtem z experimentálních napětových křivek – souřadnice maxima (obr. 1). Obdobně lze odečíst i souřadnice počátku ustáleného stavu, například hodnoty σ_{ss} . Experimentální hodnoty exponentu zpevnění c lze vypočítat jako směrnici přímkou logaritmického vyjádření rov. (1) [6]:

$$\ln \frac{\sigma}{\sigma_p} = c \cdot \ln \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \cdot \exp \left(1 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \right) \right] \quad (3)$$

Obdobným způsobem lze získat i experimentální hodnoty exponentu odpevnění s z logaritmického vyjádření rov. (2) [4]:

$$\ln \frac{\sigma - \sigma_{ss}}{\sigma_p - \sigma_{ss}} = s \cdot \ln \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \cdot \exp \left(1 - \frac{\varepsilon}{\varepsilon_p} \right) \right] \quad (4)$$

Se znalostí experimentálních hodnot hledaných parametrů je nyní možné stanovit jejich popis v závislosti na teplotě a deformační rychlosti.

3.1 Predikce na základě konstitutivních vztahů

Za účelem přesné predikce parametrů v modelech PDO byly odvozeny různé funkční předpisy. Všechny z výše zmíněných parametrů vykazují závislost na teplotě a deformační rychlosti. Společný vliv těchto proměnných je obvykle vyjadřován na základě Zenerova-Hollomonova parametru Z [7]:

$$Z = \dot{\varepsilon} \cdot \exp \left(\frac{Q}{R \cdot T} \right) \quad (5)$$

Proměnné $\dot{\varepsilon}$ (s^{-1}) a T (K) zde reprezentují deformační rychlost a teplotu deformace. Hodnota R ($8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$) je univerzální plynová konstanta a Q ($\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$) představuje aktivační energii při tváření za tepla. Z matematického hlediska představuje hodnota Q materiálovou konstantu, kterou lze stanovit regresními metodami při využití Garofalova sinus-hyperbolického vztahu; detailněji je to prezentováno v [8, 9]. Všechny potřebné parametry modelů PDO (tj. ε_p , σ_p , c a s) pak mohou být vztaženy k hodnotám Z na základě následujících vztahů [4, 6, 8, 9]:

$$\varepsilon_p = a \cdot Z^b \quad (6)$$

$$\sigma_p = \frac{1}{\alpha} \cdot \operatorname{argsinh} \sqrt{\frac{Z}{A}} \quad (7)$$

$$c = c_1 \cdot Z^{c_2} \quad (8)$$

$$s = s_1 \cdot Z^{s_2} \quad (9)$$

V rov. (6) jsou a (s) a b (-) materiálové konstanty, jež je možno stanovit ze směrnice a průsečíku přímky, dané logaritmickým vyjádřením rov. (6) [8, 9]:

$$\ln \varepsilon_p = \ln a + b \cdot \ln Z \quad (10)$$

Výpočet materiálových konstant v rov. (7), tj. A (s^{-1}), n (-) a α (MPa^{-1}), je úzce spjatý s výpočtem aktivační energie Q v rov. (5). Rov. (7) je odvozena z Garofalovy rovnice, jejíž řešení je, jak již bylo zmíněno, diskutováno v [8, 9]. V rov. (8) jsou c_1 (s) a c_2 (-)

parametry lineárně závislé na deformační rychlosti. Jejich hodnoty by tedy měly být vypočítány zvlášť při každé deformační rychlosti ze směrnice a průsečíku přímky logaritmického vyjádření rov. (8) [6]:

$$\ln c = \ln c_1 + c_2 \cdot \ln Z \Big|_{\dot{\varepsilon}=\text{konst.}} \quad (11)$$

Oba parametry by pak měly být vztaženy k rychlosti deformace [6]:

$$c_1 = M_1 \cdot \dot{\varepsilon} + M_2 \quad (12)$$

$$c_2 = M_3 \cdot \dot{\varepsilon} + M_4 \quad (13)$$

Na základě lineární regrese rov. (12) a (13) pak lze získat materiálové konstanty M_1 (s^2), M_2 (s), M_3 (s) a M_4 (-). V rov. (9) jsou s_1 (s) a s_2 (-) čistě materiálové konstanty, které lze vypočítat ze směrnice a průsečíku přímky dané logaritmickým vyjádřením rov. (9) [4]:

$$\ln s = \ln s_1 + s_2 \cdot \ln Z \quad (14)$$

Hodnoty výše diskutovaných materiálových konstant jsou pro případ oceli 38MnVS6 uvedeny v tab. 1.

Tab. 1 Materiálové konstanty pro popis parametrů ε_p v rov. (6), σ_p v rov. (7), c v rov. (8) a s v rov. (9)

Tab. 1 Materials constants to describe the parameters of ε_p in eq. (6), in eq. σ_p (7), in eq. c (8) and s in eq. (9)

A (s^{-1})	a (s)	b (-)	M_1 (s^2)
$3 \cdot 10^{12}$	$2,5 \cdot 10^{-3}$	0,2	$2,3 \cdot 10^{-2}$
M_2 (s)	M_3 (s)	M_4 (-)	n (-)
3,3	$-2,1 \cdot 10^{-4}$	$-7,7 \cdot 10^{-2}$	4,6
Q ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)	s_1 (s)	s_2 (-)	α (MPa^{-1})
316	0,4	$8,7 \cdot 10^{-2}$	$8,6 \cdot 10^{-3}$

Výše popsany postup zahrnující znalost Zenerova-Hollomonova parametru Z je široce užívaný napříč mnoha výzkumnými pracemi. V literatuře se však lze setkat i s jinými vztahy, které znalost parametru Z , respektive aktivační energie Q nevyžadují. V této práci byl jako jejich zástupce využit vztah, mající potenciál popsat jakýkoli z výše diskutovaných parametrů modelů PDO. Popisované parametry (ε_p , σ_p , c a s) označíme obecně jako proměnnou x [jednotka závisí na popisovaném parametru]. Pak x lze popsat následujícím funkčním předpisem [4]:

$$x = M \cdot \dot{\varepsilon}^m \cdot \exp(-P \cdot T) \quad (15)$$

V rov. (15) je M [jednotka závisí na popisovaném parametru, tj. MPa nebo 1] a m (-) koeficient, respektive exponent deformační rychlosti, P (K^{-1}) je koeficient teploty deformace. Exponent m je teplotně závislý. Jeho hodnoty by tedy měly být stanoveny pro každou teplotní hladinu jako směrnice přímky dané logaritmickým vyjádřením vztahu v rov. (15) [4]:

$$\ln x = m \cdot \ln \dot{\epsilon} - P \cdot T + \ln M \Big|_{T=\text{konst.}} \quad (16)$$

Získané hodnoty exponentu m pak lze vztáhnout k hodnotám teplot [4]:

$$m = m_1 - m_2 \cdot \frac{1}{T} \quad (17)$$

Lineární regresí lze z rov. (17) získat materiálové konstanty m_1 (-) a m_2 (K). Hodnoty materiálových konstant P a M lze získat lineární regresí z průsečíku I (-) přímkou (16) [4]:

$$I = -P \cdot T + \ln M \quad (18)$$

Hodnoty výše diskutovaných materiálových konstant jsou pro případ oceli 38MnVS6 uvedeny v tab. 2.

Tab. 2 Materiálové konstanty pro popis parametrů ϵ_p , σ_p , c a s vztahem v rov. (15)

Tab. 2 Material constants for description of the parameters of ϵ_p , σ_p , c and s by relationship in eq. (15)

x	M (různé)	m_1 (-)	m_2 (K)	P (K ⁻¹)
ϵ_p	27,3	0,4	350	$3,3 \cdot 10^{-3}$
σ_p	$12,2 \cdot 10^3$	0,5	422	$3,6 \cdot 10^{-3}$
c	$3,6 \cdot 10^{-2}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	156	$-1,7 \cdot 10^{-3}$
s	20,3	0,4	255	$1,1 \cdot 10^{-3}$

3.2 Predikce na základě umělých neuronových sítí

Na rozdíl od výše diskutované metody využívající známé funkční závislosti mezi závisle a nezávisle proměnnými nevyžaduje metoda UNS znalost těchto matematických závislostí [3, 10]. Jedná se o metodu tzv. černé skříňky, spojující vstupní data (nezávisle proměnné – v našem případě vektory teplot a deformačních rychlostí) s výstupními daty (závisle proměnnými – parametry modelů PDO) pomocí dané sady přenosových funkcí. Nejrozšířenějším typem UNS je v případě popisu PDO tzv. Multi-layer Feed-Forward Artificial Neural Network with the Back-Propagation (BP) learning algorithm, neboli vícevrstvá dopředná umělá neuronová síť s algoritmem učení založeným na zpětném šíření odchylky výpočtu [11, 12].

Prvním krokem při sestavení UNS je rozdělení vstupních dat (vektor teplot a vektor deformačních rychlostí) a příslušných výstupních dat (vektor příslušného parametru modelu PDO) na data trénovací, validační a testovací. Trénovací a validační sada jsou využívány v počáteční fázi přípravy neuronové sítě (fáze trénování, či učení). Testovací sada pak slouží k verifikaci predikčních schopností vytrénované sítě [13]. Pro případ oceli 38MnVS6 je k dispozici dvacet experimentálních napětových křivek, tj. dvacet kombinací teplot a deformačních rychlostí, k nimž náleží příslušné experimentální hodnoty zkoumaných parametrů modelů PDO. Pro účely trénování bylo vybráno 60 % kombinací (modře). Validační sada

(zeleně) a sada testovací (červeně) pak obsahovaly obě shodně 20 % kombinací (tab. 3).

Tab. 3 Rozdělení dat pro sestavení umělých neuronových sítí

Tab. 3 Data splitting for preparation of artificial neural networks

$T / \dot{\epsilon}$	0,1 s ⁻¹	1 s ⁻¹	10 s ⁻¹	100 s ⁻¹
1553 K	x	x	x	x
1473 K	x	x	x	x
1373 K	x	x	x	x
1273 K	x	x	x	x
1123 K	x	x	x	x

Druhým krokem při sestavení UNS je normalizace vstupních dat (teplot a deformačních rychlostí). Tento krok je zařazován z toho důvodu, že vektory vstupních proměnných mají často rozdílnou distribuci dat a rozměry. Tato skutečnost zapříčiňuje nižší rychlosti konvergence a přesnosti predikce. Proces normalizace má tedy zajistit, aby vstupní hodnoty byly bezrozměrné a jejich směrodatná odchylka byla rovna 1,0 [14]. V této práci byla vstupní data normalizována na základě následujícího funkčního vztahu [15]:

$$p_{i,norm} = \frac{p_i - \mu}{s} \quad (19)$$

Proměnná p_i představuje vstupní hodnoty sítě (tedy teploty a deformační rychlosti), $p_{i,norm}$ jsou normalizované vstupní hodnoty. Střední hodnoty vstupních vektorů μ a jejich výběrové směrodatné odchylky s se určují na základě následujících vztahů [16]:

$$\mu = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n p_i \quad (20)$$

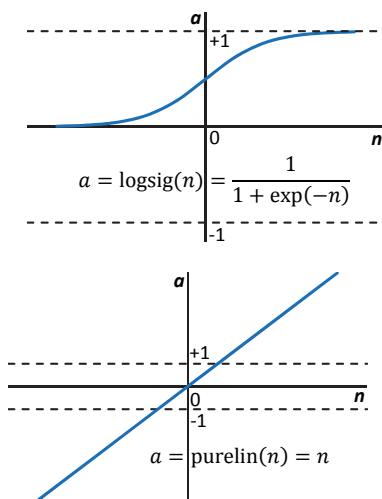
$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \cdot \sum_{i=1}^n (p_i - \mu)^2} \quad (21)$$

Hodnota n (-) v rov. (20) a (21) reprezentuje počet zahrnutých datových bodů (kombinací T a $\dot{\epsilon}$).

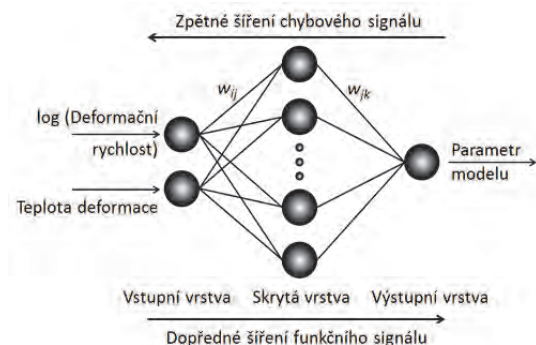
Pozn. 1: Hodnoty μ podle rov. (20) a s podle rov. (21) se určují pouze pro trénovací sadu. Při normalizaci sady validační a testovací je pak využito stejných hodnot μ a s . Pozn. 2: Není důvod normalizovat výstupní data sítě (vektor příslušného parametru modelu PDO) – výstupní je pouze jeden vektor [13].

Nyní lze přejít k sestavení architektury (topologie) neuronové sítě. UNS je v zásadě tvořena vstupní vrstvou, výstupní vrstvou a jednou nebo více skrytými vrstvami. Počet skrytých vrstev je ovlivněn povahou řešené problematiky. V mnoha případech postačuje jen jedna skrytá vrstva [10]. Každá vrstva je tvořena jedním nebo více neurony (přesněji perceptrony – matematické modely biologických neuronů). Počet neuronů ve vstupní vrstvě je dán počtem vektorů vstupních proměnných (v případě této práce se jedná o vektor teplot a vektor deformačních rychlostí). Počet neuronů ve výstupní vrstvě je dán počtem vektorů výstupních

proměnných (v tomto případě je to vektor popisovaného parametru modelu PDO). Počet neuronů ve skryté vrstvě je ovlivněn povahou řešené problematiky – nastavení vhodného počtu neuronů je potřeba odzkoušet na základě výstupů, jež vrací vytvořená a tzv. vytrénovaná síť [17]. Neuronu jsou navzájem propojeny synaptickými váhami w . Tyto váhy jsou přiřazovány ke každé hodnotě vstupující do neuronů ve skryté a výstupní vrstvě na základě relativní důležitosti vzhledem k ostatním vstupním hodnotám. Uvnitř každého neuronu dochází k sečtení jeho vstupních hodnot násobených přiřazenými váhami, k nimž se dále přičítá tzv. práh (bias) – vzniká vážená suma n [17, 18]. Každý neuron má dále přiřazenou tzv. přenosovou (též aktivační) funkci. Jejím účelem je převést váženou sumu vstupů neuronu n na výstup neuronu a . Přenosových funkcí existuje více typů. Pro skrytou vrstvu jsou obvykle používány funkce nelineární. Jelikož většina v praxi řešených problémů má nelineární charakter, je zapotřebí tuto nelinearitu zohlednit. Pro výstupní vrstvu je pak typické využití funkce lineární. V této práci byla využita pro neurony ve skryté vrstvě logistická sigmoidální funkce a ve vrstvě výstupní čistě lineární funkce (obr. 2) [13]. Architektura sítě vytvořená pro potřeby predikce parametrů modelů PDO je schematicky vyobrazena na obr. 3.



Obr. 2 Použité přenosové funkce pro skrytou a výstupní vrstvu [13]
Fig. 2 Utilized transition functions for the hidden and output layer [13]



Obr. 3 Schématické znázornění architektury umělé neuronové sítě
Fig. 3 Schematic illustration of the artificial neural network architecture

Matematicky lze procesy uvnitř neuronů, probíhající u vícevrstvých dopředných umělých neuronových sítí, popsat rov. (22) až (25); týká se to dopředného šíření funkčního signálu – obr. 3 [14]:

$$n_j = \sum_{i=1}^I (w_{ij} \cdot a_i) + b_j \quad (22)$$

$$a_j = \varphi(n_j) = \varphi\left(\sum_{i=1}^I (w_{ij} \cdot a_i) + b_j\right) \quad (23)$$

$$n_k = \sum_{j=1}^J (w_{jk} \cdot a_j) + b_k = \dots \quad (24)$$

$$\dots = \sum_{j=1}^J \left(w_{jk} \cdot \varphi\left(\sum_{i=1}^I (w_{ij} \cdot a_i) + b_j\right) \right) + b_k$$

$$a_k = \psi(n_k) = \psi\left(\sum_{j=1}^J (w_{jk} \cdot a_j) + b_k\right) = \dots \quad (25)$$

$$\dots = \psi\left(\sum_{j=1}^J \left(w_{jk} \cdot \varphi\left(\sum_{i=1}^I (w_{ij} \cdot a_i) + b_j\right) \right) + b_k \right)$$

V rov. (22) až (25) jsou i, j, k čísla neuronů ve vstupní, skryté a výstupní vrstvě. Hodnoty I a J odpovídají maximálním počtům neuronů ve vstupní a skryté vrstvě. V této práci je $I = 2$; velikost J závisí na povaze řešené úlohy. Hodnota n_j je vážená suma j -tého neuronu ve skryté vrstvě, n_k je vážená suma k -tého neuronu ve výstupní vrstvě. Veličina a_i je výstupní hodnota i -tého neuronu vstupní vrstvy (prakticky odpovídá normalizovaným hodnotám vstupních vektorů – zde teplot a deformačních rychlostí), a_j je výstupní hodnota j -tého neuronu ve skryté vrstvě, a_k je výstupní hodnota k -tého neuronu ve výstupní vrstvě (prakticky se jedná o hodnotu sledovaného parametru modelu PDO). Veličina w_{ij} je hodnota váhy mezi i -tým neuronem vstupní vrstvy a j -tým neuronem skryté vrstvy; w_{jk} je hodnota váhy mezi j -tým neuronem skryté vrstvy a k -tým neuronem výstupní vrstvy. Veličiny b_j a b_k jsou prahové hodnoty (tzv. hodnoty bias) j -tého neuronu skryté vrstvy a k -tého neuronu výstupní vrstvy. Označení φ a ψ představuje přenosové funkce pro skrytou a výstupní vrstvu (konkrétní funkce použité v této práci – viz obr. 2) [14].

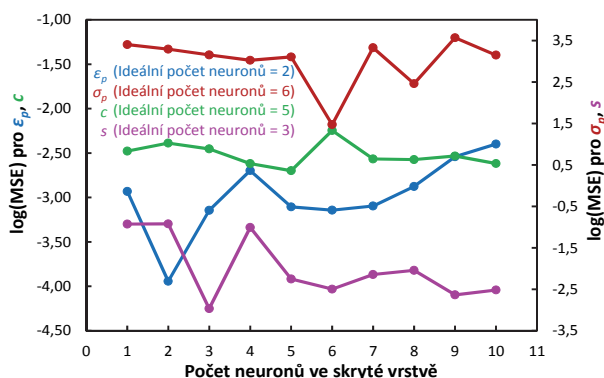
Po sestavení neuronové sítě je zapotřebí tuto síť vytrénovat (naučit), tak aby vracela hodnoty sledovaných parametrů co nejvíce se přibližující experimentálním hodnotám. Toho je dosaženo správným nastavením synaptických vah, w_{ij} a w_{jk} a prahových hodnot b_j a b_k v rov. (22) až (25), které jsou zprvu nastaveny náhodně. Proces učení sítě je založen na metodě nejmenších čtverců, při níž dochází k minimalizaci chybové funkce [12]:

$$MSE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n [y_i - y(x_i)]^2 \quad (26)$$

MSE (Mean Square Error) – střední kvadratická odchylka, n (-) představuje počet zahrnutých datových

bodů, y_i jsou experimentální hodnoty sledovaných parametrů, a $y(x_i)$ jsou jejich hodnoty predikované vytrénovanou sítí [12]. Proces učení lze realizovat řadou v posledních letech vyvinutých algoritmů [19]. Back-Propagation (BP) algoritmus (zpětné šíření chybového signálu) s Levenbergovou-Marquardtovou minimalizační funkcí (LM) patří mezi jedny z často užívaných. Většinou poskytuje nejlepší výsledky ve vztahu k přesnosti výstupů a doby nutné k trénování [10, 11]. BP algoritmus využívá odchylku výpočtu od experimentálních hodnot na výstupu sítě, kterou zpětně šíří strukturou sítě (určuje odchylky na jednotlivých neuronech) [20]. Pomocí LM funkce pak dochází k výpočtu nových váhových a prahových hodnot. Proces učení je iterační. Jeho ukončení je možné například dosažením nastavené odchylky výpočtu, nebo nastaveného počtu iterací [18]. Princip minimalizace funkce metodou Levenberg-Marquardt je uveden v [21, 22].

Klíčovým faktorem, ovlivňujícím přesnost výsledků vytrénované sítě je počet neuronů ve skryté vrstvě. Pro určení ideálního počtu neuronů je zapotřebí sestavenou neuronovou síť vytrénovat pro různé počty skrytých neuronů – na základě přesnosti výsledků, vrácených jednotlivými tréninky lze poté vybrat ideální podobu neuronové sítě [12, 14]. Graf na obr. 4 ukazuje vývoj odchylky MSE v závislosti na počtu neuronů ve skryté vrstvě pro čtyři sestavené neuronové sítě (jedna síť pro každý z hledaných parametrů modelů PDO u oceli 38MnVS6).



Obr. 4 Odchylky výstupů neuronových sítí při rozdílném počtu neuronů v jejich skrytých vrstvách

Fig. 4 Deviations of the neural networks outputs at different number of neurons in their hidden layers

Sestavení, trénování a následné využití výše uvedených umělých neuronových sítí bylo realizováno v softwaru GNU Octave-4.2.1 [23] s nadstavbovým nástrojem Neural Network Package [24]. Jedná se o volně šiřitelnou verzi široce využívaného programu MATLAB® [25] s nadstavbou Neural Network Toolbox™ [26]. Příklad zápisu obecného zdrojového kódu pro sestavení a trénování umělých neuronových sítí v softwaru Octave je uveden v [13].

4. Diskuse výsledků

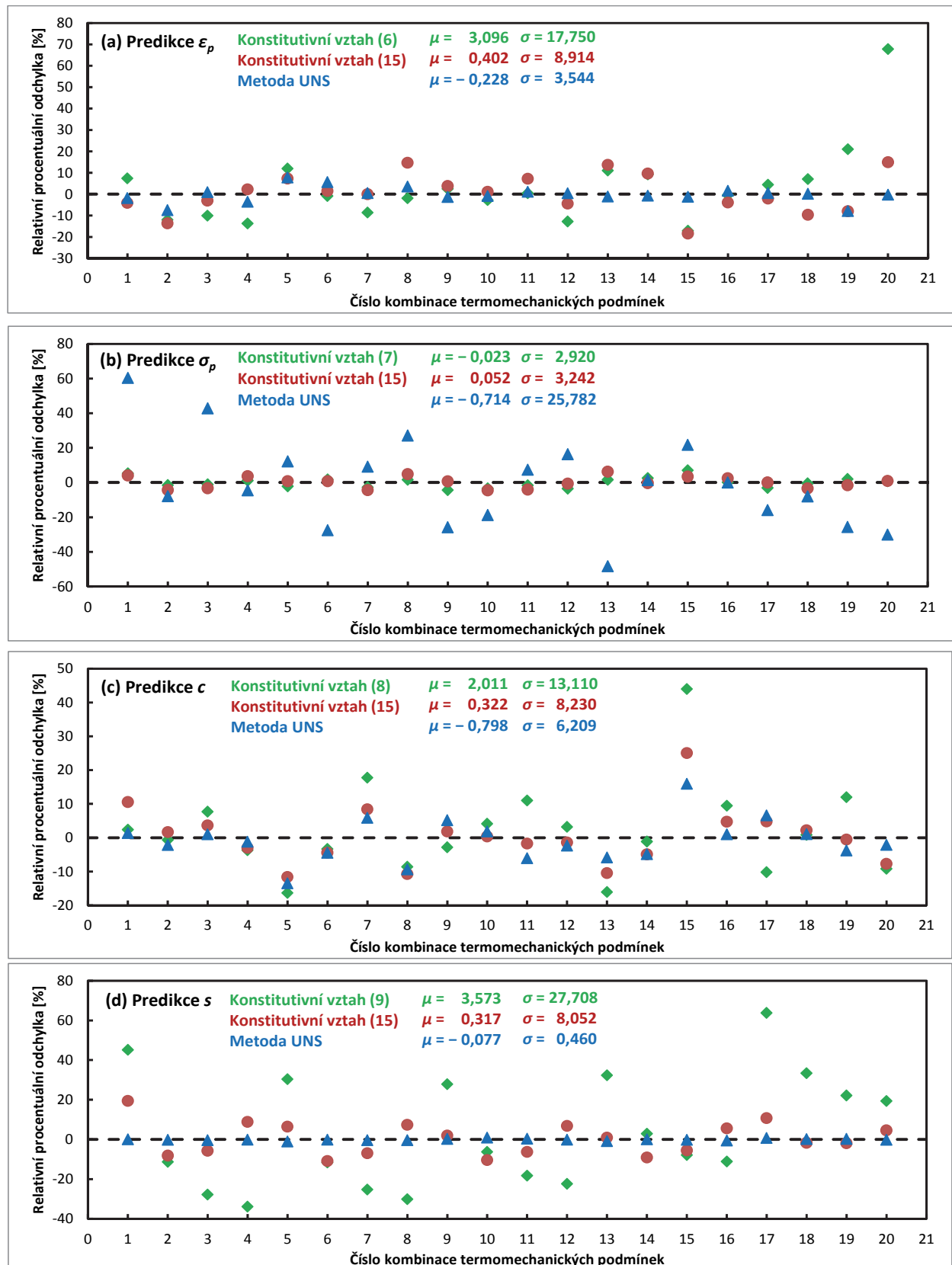
Pro výstupy výše uvedených metod predikce parametrů modelů PDO byla realizována statistická analýza, na jejímž základě lze formulovat závěrečné doporučení. Přesnost výstupů je hodnocena na základě relativní odchylky η (%) v rov. (27), její střední hodnoty μ v rov. (28) a směrodatné odchylky σ v rov. (29) [12, 16]:

$$\eta = \frac{y(x_i) - y_i}{y_i} \cdot 100 \quad (27)$$

$$\mu = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \eta_i \quad (28)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (\eta_i - \mu)^2} \quad (29)$$

V rov. (27) až (29) představuje n (-) počet zahrnutých datových bodů (prakticky odpovídá počtu kombinací teplot a deformačních rychlostí), y_i jsou experimentální hodnoty sledovaných parametrů a $y(x_i)$ jsou jejich predikované hodnoty, η_i jsou jednotlivé hodnoty η určené vztahem v rov. (27) pro každou z kombinací termomechanických podmínek. Srovnání hodnot relativní odchylky η (%) pro všechny výše diskutované metody predikce je graficky uvedeno na obr. 5. Jak je z uvedených grafických závislostí patrné, tak hodnoty η jsou v případě metody UNS blízké nule. U hodnot píkove deformace ϵ_p se odchylka η pohybuje do 8 % (obr. 5 a). U exponentu zpevnění c do 16 % (obr. 5c) a u exponentu odpevnění s dokonce pouze do 1,03 % (obr. 5d). Ostatní metody využívající klasických funkčních předpisů takřka vždy vykazují odchylky vyšší. Výjimkou je v tomto ohledu predikce píkového napětí σ_p , kdy metoda UNS vykazuje mnohem vyšší nepřesnosti. Klasické metody zde naopak dosahují mnohem přesnějších výsledků (obr. 5 b). Dva indikátory, jmenovitě střední hodnota η – odchylky μ a směrodatná odchylka σ jsou významné z hlediska hodnocení rozptylu procentuální odchylky η . Střední hodnota μ zde reprezentuje průměrnou hodnotu sady odchylek η , zatímco směrodatná odchylka σ poskytuje informaci o tom, jak blízko je celá sada hodnot η k její průměrné hodnotě. Hodnoty μ jdoucí k nule a nízké hodnoty σ naznačují vysokou přesnost popisu. Metoda UNS a metoda využívající rov. (15) dosahují v porovnání s první metodou (využívající vztahy založené na parametru Z) téměř vždy mnohem příznivějších hodnot μ (výjimkou je predikce hodnot σ_p). Metoda UNS (až na σ_p) však vykazuje nejnižší hodnoty σ , z čehož lze usuzovat, že metoda UNS poskytuje ve většině případů nejpresnější popis. Z výše uvedeného vyplývá, že pro predikci parametrů modelů PDO, které jsou dány rov. (1) a (2), je nejvhodnější nasadit umělé neuronové sítě, popřípadě funkční vztah v rov. (15) (pakliže neuronové sítě nevrací dostatečně přesné výsledky).



Obr. 5 Porovnání relativních procentuálních odchylek parametrů modelů přirozeného deformačního odporu predikovaných prostřednictvím konstitutivních vztahů a umělých neuronových sítí

Fig. 5 Comparison of relative percentage error of parameters of natural flow stress models predicted by constitutive equations and artificial neural networks

Závěr

V předložené práci jsou diskutovány tři způsoby, jimiž je možno predikovat parametry v matematických modelech určených k popisu napětových křivek za tepla. První dvě metody využívají známých funkčních závislostí mezi sledovanými parametry a termo-mechanickými podmínkami (teploty a deformační rychlosti). První z metod využívá pro popis těchto parametrů různé matematické vztahy, které zahrnují tzv. Zenerův-Hollomonův parametr Z , představující teplotně kompenzovanou deformační rychlost. Druhá metoda je založena na jediném funkčním vztahu (nevyužívá parametr Z), který umožňuje popis všech sledovaných parametrů (liší se pouze hodnoty materiálových konstant). Třetí metoda je založena na využívání umělých neuronových sítí, které po vytrénování umožňují vracet hodnoty sledovaných parametrů. Všechny tři přístupy byly otestovány na parametrech dvou modelů, společně popisujících napětové křivky v širokých intervalech termomechanických podmínek. Sledovanými parametry byla píkova deformace, píkové napětí, exponent zpevnění a odpevnění. Šetření bylo realizováno s využitím experimentálních napětových křivek oceli 38MnVS6. Na základě statistické analýzy výsledků všech tří metod bylo možno formulovat závěrečné doporučení. Pro predikci parametrů v daných modelech se doporučuje použít metodu využívající umělé neuronové sítě (většinou přesnější výsledky). Pakliže tato metoda nebude vracet dostatečně přesné výsledky, je vhodné použít prezentovaný funkční vztah, jenž nezahrnuje hodnoty parametru Z .

Poděkování

Tato práce vznikla při řešení projektu č. LO1203 „Regionální materiálově technologické výzkumné centrum - program udržitelnosti“ financovaného Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

Literatura

- [1] GRONOSTAJSKI, Z. The Constitutive Equations for FEM Analysis. *Journal of Materials Processing Technology*, 106 (2000) 1-3, 40–44. Dostupné z doi:10.1016/S0924-0136(00)00635-X.
- [2] SHAFAT, M. A., OMIDVAR, H., FALLAH, B. Prediction of Hot Compression Flow Curves of Ti-6Al-4V Alloy in $\alpha + \beta$ Phase Region. *Materials & Design*, 32 (2011) 10, 4689-4695. Dostupné z doi:10.1016/j.matdes.2011.06.048
- [3] WU, Si-Wei, et al. The Improvement on Constitutive Modeling of Nb-Ti Micro Alloyed Steel by Using Intelligent Algorithms. *Materials & Design*, 116 (2017), 676–685. Dostupné z doi:10.1016/j.matdes.2016.12.058
- [4] OPĚLA, P. et al. New Model Predicting Flow Curves in Wide Range of Thermomechanical Conditions of 38MnVS6 Steel. In *Metal 2016: 25th Anniversary International Conference on Metallurgy and Materials: Conference Proceedings*, Brno, 2016. Ostrava: Tanger Ltd, 2017, s. 458–463. ISBN 978-80-87294-67-3.
- [5] EBRAHIMI, R., SOLHJO, S. Characteristic Points of Stress-Strain Curve at High Temperature. *International Journal of ISSI*, 41 (2007) 1-2, 24–27.
- [6] CINGARA, A., McQUEEN, H. J. New Formula for Calculating Flow Curves from High Temperature Constitutive Data for 300 Austenitic Steels. *Journal of Materials Processing Technology*, 36 (1992) 1, 31–42. Dostupné z doi:10.1016/0924-0136(92)90236-L.
- [7] ZENER, C., HOLLOMON, J. H. Effect of Strain Rate upon Plastic Flow of Steel. *Journal of Applied Physics*, 15 (1944) 1, 22–32. Dostupné z doi: 10.1063/1.1707363.
- [8] SCHINDLER, I., BOŘUTA, J. *Utilization Potentialities of the Torsion Plastometer*. Žory: OLDPRINT, 1998, 140 s. ISBN 83-910722-0-7.
- [9] SCHINDLER, I. aj. Vliv výpočetní metody na hodnotu aktivační energie aluminidu železa při tváření za tepla. *Hutnické listy*, 65 (2012) 4, 55–59. ISSN 0018-8069.
- [10] YAN, J. et al. Flow Behavior of Al-6.2Zn-0.70Mg-0.30Mn-0.17Zr Alloy during Hot Compressive Deformation Based on Arrhenius and ANN models. *Transaction of Nonferrous Metals Society of China*, 27 (2017), 638–647. Dostupné z doi: 10.1016/S1003-6326(17)60071-2.
- [11] MA, X. et al. Modeling Constitutive Relationship of BT25 Titanium Alloy during Hot Deformation by Artificial Neural Network. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 21 (2012) 8, 1591–1597.
- [12] QUAN, G. Z. et al. Modeling the Hot Deformation Behaviors of As-Extruded 7075 Aluminum Alloy by an Artificial Neural Network with Back-Propagation Algorithm. *High Temperature Materials and Processes*, 36 (2017) 1, 1–13. Dostupné z doi: 10.1515/htmp-2015-0108.
- [13] SCHMID, M. D. A Neural Network Package for Octave – User's Guide Version: 0.1.9.1 [online]. 2009. [vid. 2017-10-04]. Dostupné z: https://mafiadoc.com/a-neural-network-package-for-octave-user39s-guide-version0191_59b4e5641723ddcc6daf493.html
- [14] LV, Junya, REN, Huiyu, GAO, Kai. Artificial Neural Network-based Constitutive Relationship of Inconel 718 Superalloy Construction and Its Application in Accuracy Improvement of Numerical Simulation. *Applied Sciences*, 7 (2017) 2. ISSN 2076-3417. Dostupné z doi: 10.3390/app7020124
- [15] Prestd [online]. Neural Network Toolbox™ [vid. 2017-10-04]. Dostupné z: <http://cens.ioc.ee/local/man/matlab/toolbox/nnet/prestd.html>
- [16] Charakteristiky variability (proměnlivosti souboru) [online]. [vid. 2017-10-04]. Dostupné z: <https://cit.vfu.cz/statpotr/POTR/Teorie/Predn1/variabil.htm>
- [17] KARN, Ujjwal. A Quick Introduction to Neural Networks [online]. The Data Science Blog [vid. 2017-10-04]. Dostupné z: <https://ujjwalkarn.me/2016/08/09/quick-intro-neural-networks/>
- [18] JI, Guoliang et al. Comparative Study of Phenomenological Constitutive Equations for an As-Rolled M50NiL Steel during Hot Deformation. *Journal of Alloys and Compounds*, 695 (2017) 2389–2399. Dostupné z doi: 10.1016/j.jallcom.2016.11.131
- [19] FU, R. Q., T. W. XU and Z. X. PAN. Modeling of the Adsorption of Bovine Serum Albumin on Porous Polyethylene Membrane by Back-Propagation Artificial Neural Network. *J. Membr. Sci.*, 251 (2005), 137–144.
- [20] Principles of Training Multi-Layer Neural Network Using Back propagation [online]. [vid. 2017-10-04]. Dostupné z: http://home.agh.edu.pl/~vlsi/AI/backp_t_en/backprop.html
- [21] LEVENBERG, Kenneth. A Method for the Solution of Certain Non-Linear Problems in Least Squares. *Quarterly of Applied Mathematics*, 2 (1944) 2, 164–168. ISSN 1552-4485. Dostupné z doi: 10.1090/qam/10666
- [22] MARQUARDT, Donald W. An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11 (1963) 2, 431–441. ISSN 2168-3484. Dostupné z doi: 10.1137/0111030
- [23] GNU Octave [online]. [vid. 2017-10-05]. Dostupné z: <https://www.gnu.org/software/octave/>
- [24] Octave's neural network package [online]. Source Forge [vid. 2017-10-05]. Dostupné z: <https://sourceforge.net/projects/octnnetb/>
- [25] MATLAB® [online]. MathWorks® [vid. 2017-10-05]. Dostupné z: <https://ch.mathworks.com/products/matlab.html>
- [26] Neural Network Toolbox™ [online]. MathWorks® [vid. 2017-10-05]. Dostupné z: <https://ch.mathworks.com/products/neural-network.html>