

Нейросетевой метод нахождения оксидного состава металла по кривой неизотермического газовыделения

Кнорре Д. Д.^{1*}, Крылов А. С.¹, Григорович К. В.²,
Фельдман Ю. К.²

^{1*} Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики,
Московский государственный университет
имени М.В.Ломоносова, Ленинские горы, 1-52, Москва, 119991,
Россия.

² Лаборатория диагностики материалов, ИМЕТ РАН, Ленинский
проспект, 49, Москва, 119334, Россия.

*Автор(ы), ответственный(ые) за переписку. E-mail(s):
knorre.dmitry.junior@gmail.com;

Соавторы: kryl@cs.msu.ru; imet@imet.ac.ru; imet@imet.ac.ru;

Аннотация

Оксидные включения в стали могут сильно изменять её рабочие свойства. Один из методов анализа состава оксидных включений в металле – Фракционный Газовый Анализ (ФГА). В результате ФГА получаются кривые зависимости скорости выделения СО из образца металла и температуры от времени. В данной работе предложен нейросетевой алгоритм для дальнейшей интерпретации полученных зависимостей. Для этого используется полносвязная нейронная сеть, которая обучается предсказывать скорость выделения СО из каждого типа оксидных включений. При этом требуется, чтобы предсказанные индивидуальные зависимости удовлетворяли дифференциальным уравнениям моделирующим процесс выделения СО для отдельного оксидного включения. Данное требование было встроено в функцию потерь за счет использования технологии нейронных сетей учитывающих физическую информацию. Предложенный алгоритм был протестирован на образцах двух металлов разного состава. В ходе тестирования была показана эффективность практического применения разработанного алгоритма.

Ключевые слова: Нейросеть учитывающая физическую информацию, Фракционный газовый анализ, Оксидные включения, Дифференциальное уравнение, Полносвязная нейронная сеть.

Получено редакцией 26.06.2024; внесены авторские правки 15.11.2024; принята к публикации 20.11.2024

1 Введение

Неметаллические включения в стали могут отрицательно влиять на её рабочие свойства [1]. Так, например, с оксидными включениями связывают усталостное образование трещин в подшипниковой стали [2], а также частичную потерю прочности, жесткости и устойчивости к коррозии рельсовой стали [3]. При этом разные виды оксидных включений могут оказывать различное влияние на свойства стали [4], поэтому определение состава оксидных включений в стали является крайне важным при анализе качества металла. В настоящий момент разработано множество методов детекции и анализа оксидных включений в стали [5, 6], в их числе фракционный газовый анализ, на интерпретации результатов которого концентрируется данная работа.

Фракционный Газовый Анализ (ФГА) представляет собой модификацию метода высокотемпературной экстракции кислорода и азота из образца в несущем газе при заданном режиме нагрева. Метод основан на различиях в термодинамической стабильности оксидов и нитридов и возможности их фракционного разделения при монотонном нагреве в графитовой печи анализатора. При этом неметаллические включения, восстанавливаются углеродом с образованием CO . После этого CO доокисляется до углекислого газа CO_2 , который регистрируется ИК-ячейкой аппарата. Таким образом, на выходе прибор выдает эвалограмму (рис. 1) - информацию о зависимости скорости выделения CO_2 из образца от температуры [7]. Подробнее о ФГА и последующей предварительной обработке полученных эвалограмм написано в следующей части.

Однако, эвалограмма сама по себе не дает информацию о типах оксидных включений. Для интерпретации результатов ФГА, в работе [8] был предложен алгоритм для их предварительной обработки, а также метод анализа функции, полученной в результате ФГА. В данном методе эвалограмма раскладывается на сумму функций, каждая из которых удовлетворяет дифференциальному уравнению, моделирующему процесс выделения кислорода из оксидного включения в образце металла при неизотермическом плавлении:

$$V'(t) = V(t)(f'(t) - e^{f(t)}). \quad (1)$$

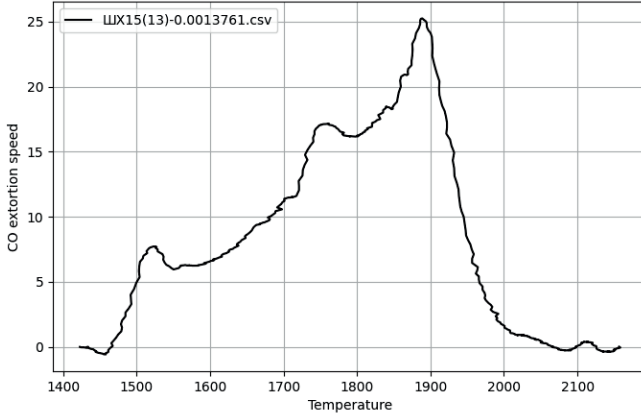


Рис. 1: Пример эвалограммы полученной в результате ФГА

Здесь $V(t)$ - функция зависимости скорости выделения O из образца от времени, $f(t) = K - \frac{E}{T(t)}$, $T(t)$ - функция зависимости температуры от времени, K и E константы. У такого уравнения при добавлении к нему начального условия $V(t_0) = V_0$ существует аналитическое решение по форме напоминающее гауссиан. Параметр E в этом уравнении отвечает за ширину пика, а параметр K можно рассчитать, зная точку T_{max} , в которой достигается максимум пика, и параметр E , используя формулу

$$K = \frac{E}{T_{max}} + \log\left(\frac{E}{(T_{max})^2}\right). \quad (2)$$

При этом описанный в [8] алгоритм не позволяет дать ответ на вопрос, выделению CO из какого оксидного включения соответствует каждый из пиков. Кроме того иногда требуется при наличии результатов анализа разных образцов одной стали получить разложение, достаточно хорошо приближающее все кривые одновременно, что предложенный в работе [8] алгоритм не позволяет сделать. В рамках данной работы был разработан алгоритм призванный решить описанные проблемы.

Целью данной работы являлась разработка нейросетевого алгоритма позволяющего разложить функции, полученные при помощи ФГА, на сумму функций, каждая из которых удовлетворяет дифференциальному уравнению (1).

Задача разложения функции на сумму функций специального вида часто возникает при обработке сигналов. Например, она встречается при обнаружении пиков на хроматограммах [9], спектральном анализе сейсмограмм [10], а также в задачах разделения сигнала [11]. Для решения

этой задачи существует множество классических подходов [12, 13]. Однако, последнее время для её решения также применяются нейросетевые алгоритмы [14–16].

В данный момент набирает популярность нейросетевой метод решения дифференциальных уравнений, основанный на использовании нейронных сетей, учитывающих физическую информацию (PINN) [17]. В рамках этого метода нейронная сеть обучается предсказывать значение функции в точках из некоторой области так, чтобы выполнялось дифференциальное уравнение, которому эта функция должна удовлетворять. При этом производные в уравнении считаются при помощи технологии автоматического дифференцирования и обратного распространения ошибки. Нейронные сети, учитывающие физическую информацию уже были успешно применены для решения задач жидкостной механики [18], теплопроводности [19] и распространения волн [20]. Данный подход также легко обобщается для решения обратных задач [17, 21] и интегральных уравнений [22, 23]. Ещё одним достоинством данного подхода является возможность учета экспериментальных данных при поиске решения [24].

В данной работе реализован метод решения задачи разложения сигнала на пики, с использованием нейронных сетей, учитывающих физическую информацию. Данный выбор, при поиске функций составляющих сигнал, обусловлен желанием учитывать термодинамическую модель, описывающую процесс выделения CO из оксидов при их неизотермическом нагреве.

Разработанный алгоритм принимает на вход список из N_{oxides} оксидов, потенциально содержащихся в данной марке стали и $N_{references}$ кривых результатов ФГА, сделанных для $N_{references}$ различных образцов данной стали. Для каждого из N_{oxides} оксидов алгоритм также получает информацию о примерной температуре начала активного выделения T^{beg} и примерной температуре максимума выделения T^{max} кислорода из данного оксидного включения. На выходе алгоритм выдает N_{oxides} функций моделирующих выделение кислорода из каждого из N_{oxides} типов оксидных включений, потенциально содержащихся в образце. В сумме эти N_{oxides} функций должны достаточно хорошо приближать каждую из $N_{references}$ полученных экспериментально кривых.

Данный алгоритм основан на обучении нейронной сети использующей физическую информацию и реализован на языке Python с использованием пакета DeepXDE, позволяющего просто реализовывать нейронные сети, учитывающие физическую информацию [25]. В качестве библиотеки для глубокого обучения использовался пакет PyTorch [26].

Задача решается в предположении, что выделение CO из разных типов оксидных включений происходит независимо. Также считается, что

функция скорости выделения CO ($V(t)$) удовлетворяет дифференциальному уравнению (1). При этом, $f(t) = K - \frac{E}{T(t)}$, где $T(t)$ - функция зависимости температуры от времени, а K , E неизвестные коэффициенты. Кроме того в данной работе считается, что для исследуемой марки стали известен список из N_{oxides} интересующих нас оксидных включений и для них рассчитаны примерные температура начала активного выделения T^{beg} и температура максимума выделения T^{max} .

2 Получение экспериментальных данных

Основная цель данной работы – разработать алгоритм для интерпретации результатов фракционного газового анализа. Данный раздел посвящен описанию проведения данного анализа и последующей предварительной обработки полученных эвалограмм.

Целью Фракционного Газового Анализа (ФГА) является определение массы оксидных включений в металле, при помощи фиксации скорости выделения CO_2 из пробы металла при её неизотермическом плавлении [7, 8]. Данный метод основан на том факте, что температура при которой оксид начинает разлагаться различается для разных оксидов. Фракционный газовый анализ часто применяется для анализа количества оксидных включений в образце [27].

ФГА производился на приборе LECO TC600. Схема проведения ФГА приведена на рис. 2. Для проведения фракционного газового анализа

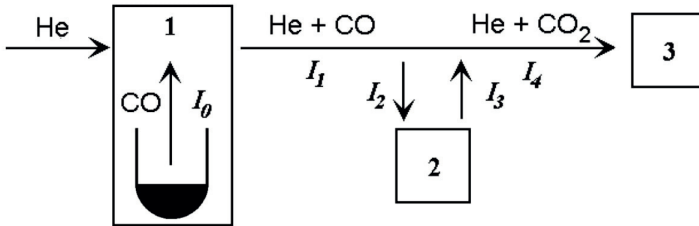


Рис. 2: Схема газоанализатора: 1. Печь анализатора. 2. Ячейка, где происходит доокисление CO до CO2. 3. ИК-ячейка. [28]

проба металла помещается в графитовый тигель в печь. В печи тигель с образцом плавится при постепенно повышающейся температуре в потоке газа-носителя (обычно гелия). При этом образец насыщается углеродом и происходит восстановление оксидов до угарного газа (3).



В приборе LECO TC600 также предусмотрено доокисление угарного газа до углекислого. Скорость поступления CO_2 фиксируется при помощи метода инфракрасной абсорбционной спектроскопии. Помимо скорости выделения CO_2 , в каждый момент времени прибор фиксирует температуру образца. Таким образом в результате ФГА получается зависимость скорости выделения CO_2 и температуры от времени. Дополнительно прибор автоматически вычисляет общую массу содержащегося в образце кислорода.

Полученная зависимость требует дальнейшей предварительной обработки. Предварительную обработку можно разделить на три основных части.

Первая часть это дополнительная коррекция температурных кривых. Для этого из предоставленного набора кривых для нескольких образцов выбирается случайная и объявляется эталонной. Затем для всех остальных кривых вычисляется кросс-корреляция (4) между ними и эталонной кривой на промежутке совпадающих температур.

$$Correlate[k] = (x * y)(k - N + 1) = \sum_{l=0}^{\|x\|-1} x_l y_{l-k+N-1}, \quad (4)$$

для $k = 0, \frac{\|x\| + \|y\|}{2}$.

Здесь x, y значения эталонной кривой и рассматриваемой кривой, $\|x\|, \|y\|$ их длины соответственно, а $N = \max(\|x\|, \|y\|)$. В случае выхода за границы массивов значения кривых считаются нулевыми. Далее для каждой кривой в полученном массиве кросс-корреляции ищется максимум. Разность индекса нулевого сдвига и индекса максимума кросс-корреляции двух массивов соответствует сдвигу при котором достигается максимум кросс-корреляции двух массивов. Таким образом можно найти наилучший сдвиг для выравнивания двух массивов [29]. После этого все найденные наилучшие сдвиги нормируются так, чтобы медианный сдвиг был равен нулю. Далее все значения кривых преобразуются в соответствии найденным нормированным наилучшим сдвигам, при этом температура остается неизменной.

Вторая часть предварительной обработки заключается в вычитании фонового выделения из сигнала. В работе [8] было предложено приближать фоновое выделение, используя формулу, зависящую от параметров H, T_{beg} и T_{end} :

$$f_b(T) = \frac{H}{1 + \exp\left(-4 \frac{T - \frac{T_{end} + T_{beg}}{2}}{T_{end} - T_{beg}}\right)}. \quad (5)$$

В данной работе T_{beg} и T_{end} были взяты 1500 и 1700, соответственно, параметр H подбирался так, чтобы выделение в конце эксперимента равнялось 0. Пример кривой с большим значением фонового выделения до и после предварительной обработки приведен на рис. 3.

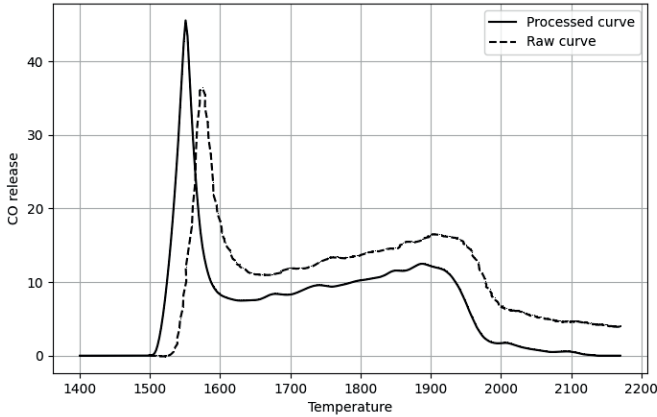


Рис. 3: Результаты ФГА для образцовой ШХ-15 стали из второй группы до предварительной обработки (пунктирная кривая) и после предварительной обработки (сплошная кривая).

В ходе последней части предварительной обработки полученные кривые сглаживаются и по кривой зависимости скорости выделения CO_2 восстанавливается зависимость скорости выделения CO из образца.

3 Описание алгоритма

Алгоритм основывается на концепции нейронных сетей, учитывающих физическую информацию. На вход этот алгоритм принимает список из N_{oxides} оксидов, температуры начала и максимума выделения для каждого из этих оксидов, а также $N_{references}$ наборов значений функций суммарного выделения и температур при которых эти значения достигаются. После этого происходит обучение нейронной сети для предсказания значений скорости выделения CO из каждого из оксидных включений по времени. Для этого на отрезке времени $[0, 800]$ берутся 1000 точек. После чего в этих точках считается функция потерь \mathcal{L} , учитывающая насколько выполняется модельные уравнения скорости выделения из каждого из оксидов и характеристики оксидов. Данная функция потерь минимизируется при помощи стохастического оптимизатора Adam [30]. При обучении модели также используются постепенное снижение скорости

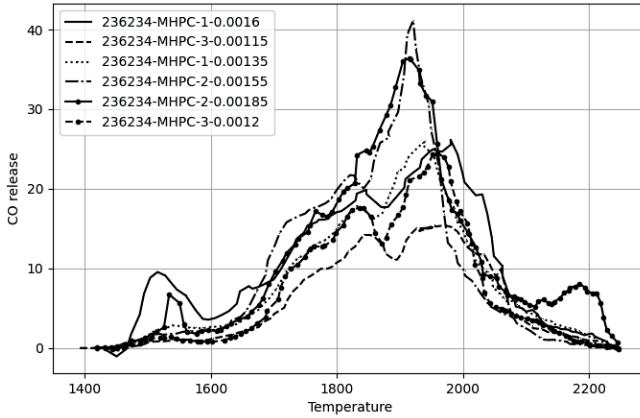


Рис. 4: Результаты ФГА для заводской ШХ-15 стали из группы МНРС-236234 до предварительной обработки.

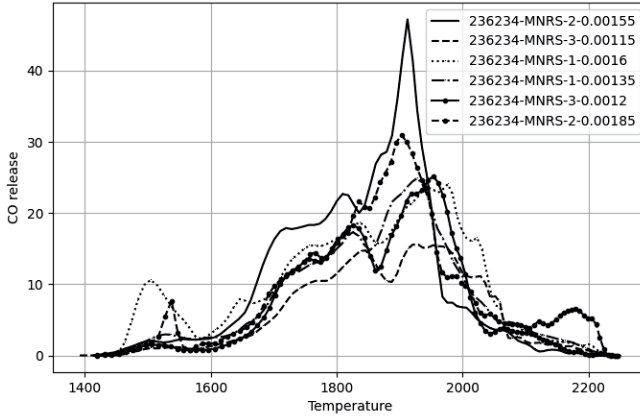


Рис. 5: Результаты ФГА для заводской ШХ-15 стали из группы МНРС-236234 до предварительной обработки без выравнивания.

обучения, передискретизация временного интервала на основе невязки и нормализация выходных данных. Далее подробнее описываются используемые модели, архитектура нейронной сети и слагаемые функции потерь.

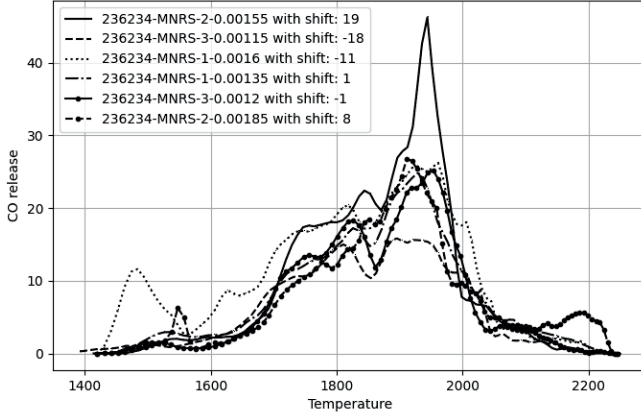


Рис. 6: Результаты ФГА для заводской ШХ-15 стали из группы МНРС-236234 до и после преобработки.

В работе [28] была разработана следующая модель выделения кислорода из объема образца. Пусть M_0 изначальная масса связанного в образце кислорода, а $M(t)$ функция зависимости массы связанного в образце кислорода от времени. Тогда при плавлении для этих величин выполняется следующее дифференциальное уравнение:

$$\begin{cases} -\frac{dM(t)}{dt} = M(t)e^{f(t)}, \\ M(t_0) = M_0. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $f(t) = K - \frac{E}{T(t)}$, $T(t)$ - функция зависимости температуры от времени, K и E константы характеризующие форму пика. Рассмотрим функцию $V(t) = -\frac{dM}{dt}$ определяющую зависимость скорости выделения кислорода из образца от времени. Продифференцировав по t уравнение (6), получим уравнение для функции $V(t)$:

$$V'(t) = V(t)(f'(t) - e^{f(t)}). \quad (7)$$

Если также известно значение функции $V(t)$ в некоторый момент времени t_0 , то формулируется задача Коши для функции $V(t)$.

$$\begin{cases} V'(t) = V(t)(f'(t) - e^{f(t)}), \\ V(t_0) = V_0. \end{cases} \quad (8)$$

Если обозначить теперь t_{max} - момент времени, в который достигается максимум скорости выделения кислорода из оксидного включения, а за $T_{max} = T(t_{max})$ - температуру в этот момент времени, тогда в

точке $t = t_{max}$ функция $V(t)$ достигает максимума, из чего следует, что $V'(t_{max}) = 0$. Отсюда при $t = t_{max}$ из уравнения (7) следует, что $e^{f(t_{max})} = f'(t_{max})$. При этом $f'(t) = \frac{ET'(t)}{(T(t))^2}$. Тогда, прологарифмировав обе части данного соотношения, можно получить следующее выражение для K :

$$K = \frac{E}{T_{max}} + \ln\left(\frac{ET'(t_{max})}{(T_{max})^2}\right). \quad (9)$$

В рамках исследуемой модели, функция температуры приближается линейной функцией $T(t) = t + T_{start}$, где T_{start} известно. В таком случае $T'(t) = 1$, и формула (9) упрощается до

$$K = \frac{E}{T_{max}} + \ln\left(\frac{E}{(T_{max})^2}\right). \quad (10)$$

Таким образом вид уравнения моделирующего процесс выделения кислорода из оксидных включений при неизотермическом плавлении зависит от двух параметров T_{max} и E .

В данной работе использовалась полносвязная нейронная сеть, состоящая из трех скрытых слоев по 50 нейронов, после каждого из которых идет функция активации - гиперболический тангенс. Последний слой состоит из N_{oxides} нейронов. Выход $\widetilde{V}_i(t)$ нейронной сети преобразуется по формуле

$$\begin{cases} V_i(t) = \text{softplus}(\widetilde{V}_i(t)), \\ V_{N_{oxides}+1}(t) = \sum_{i=1}^{N_{oxides}} V_i(t), \end{cases} \quad (11)$$

где $\text{softplus}(x) = \ln(1 + e^x)$.

Такие преобразования требуются, чтобы гарантировать неотрицательность получаемых значений скорости выделения CO из оксидов. Веса нейронной сети инициализируются случайно методом "Glorot uniform"[31].

Кроме этого в качестве тренируемых весов нейронной сети добавляются внешние тренируемые переменные: \widetilde{E}_i и \widetilde{T}_i^{max} , для $i \in \overline{1, N_{oxides}}$. По этим переменным далее пересчитываются переменные E_i , T_i^{max} и K_i по формулам

$$E_i = E_i^{initial} * 10^{(E_{scale} * \tanh(\widetilde{E}_i))}, \quad (12)$$

$$T_i^{max} = T_i^{max, initial} + (\tanh(\widetilde{T}_i^{max}) * T_{scale}^{max}), \quad (13)$$

$$K_i = \frac{E_i}{T_i^{max}} + \log\left(\frac{E_i}{(T_i^{max})^2}\right). \quad (14)$$

В этих формулах E_{scale} , T_{scale}^{max} - гиперпараметры модели, $E_i^{initial}$ - начальное значение параметра E_i для $i^{ор0}$ уравнения - одинаковое для

всех уравнений, тоже является гиперпараметром модели, а $T_i^{max,initial}$ – изначальное значение температуры, при которой достигается максимум скорости выделения кислорода из оксидного включения, определяется из соображений термодинамики для каждого из типов оксидных включений при фиксированном составе металла. Определение $T_i^{max,initial}$, а также T_i^{beg} проводилось при помощи ПО "Oxide". Параметры нейронной сети \widetilde{E}_i и T_i^{max} , для $i \in \overline{1, N_{oxides}}$ инициализируются нулем.

Схематично архитектура нейросети изображена на рис. 7.

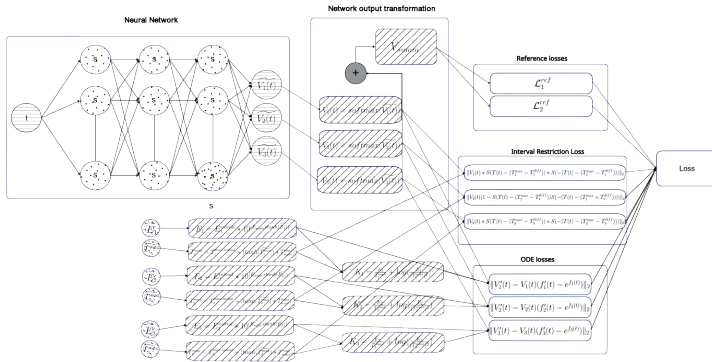


Рис. 7: Схема нейронной сети для трех оксидов и двух результатов ФГА. Элементы с горизонтальной штриховкой – входные и выходные нейроны моделирующей сети. Элементы в точку – обучаемые параметры. Элементы с косой штриховкой – преобразования применяемые к выходным значениям. Белые элементы – слагаемые функции потерь.

Основная часть алгоритма – это обучение нейронной сети описанной в предыдущем параграфе при помощи минимизации функции потерь методом Adam. Функция потерь задается взвешенной суммой $2 * N_{oxides} + N_{references}$ слагаемых. Первые N_{oxides} задаются невязкой дифференциального уравнения (7), где $V_i'(t)$ подсчитано с помощью технологии обратного распространения ошибки для каждого из оксидов. Обозначим их $\widetilde{\mathcal{L}}_i^{ode}$ для $i \in \overline{1, N_{oxides}}$. Эта невязка умножается на произведение двух сигмоид, для того чтобы уменьшить штраф за невыполнение уравнения вне интервала температур, на котором выделение может

быть физически. Таким образом первые N_{oxides} слагаемых считаются по формуле

$$\mathcal{L}_i^{ode} = \widetilde{\mathcal{L}}_i^{ode} S(T(t) - (T_i^{max} - T_i^{diff})) S(-(T(t) - (T_i^{max} + T_i^{diff}))), \quad (15)$$

где $S(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$.

Следующие N_{oxides} слагаемых отвечают за отсутствие значительного выделения из i^{oro} оксидного включения вне интервала $[T_i^{max} - T_i^{diff}, T_i^{max} + T_i^{diff}]$, где $T_i^{diff} = T_i^{max,initial} - T_i^{beg}$. Эти слагаемые считаются по формуле

$$\mathcal{L}_i^{tbeg} = \|V_i(t)(1 - S(T(t) - (T_i^{max,initial} - T_i^{diff}))) \cdot S(-(T(t) - (T_i^{max,initial} + T_i^{diff})))\|_2. \quad (16)$$

Далее следует $N_{references}$ слагаемых, которые отвечают за соответствие суммы предсказанных функций, полученным результатам фракционного газового анализа. Для j^{oir} экспериментальной кривой задаются моменты времени, в которые известна скорость выделения угарного газа из образца, и значение скорости выделения угарного газа из образца. Однако выделение CO до достижения температуры плавления стали не информативно, так как оно включает в себя выделение поверхностного кислорода. Поэтому данные ФГА при температуре меньшей температуры плавления стали $T^{melting}$ отбрасываются. Таким образом оставшиеся слагаемые считаются как средний квадрат разности суммы скоростей выделения угарного газа из образца $V_{N_{oxides}+1}$ и результатов фракционного газового анализа в информативных точках

$$\mathcal{L}_j^{ref} = MSE(V_{N_{oxides}+1}, V_j^{reference}), \text{ для } j \in \overline{1, N_{references}}. \quad (17)$$

Суммарная функция потерь принимает вид

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{N_{oxides}} (10^4 * \mathcal{L}_i^{ode} + 10^2 * \mathcal{L}_i^{tbeg}) + \sum_{j=1}^{N_{references}} \left(\frac{1}{N_{references}} * \mathcal{L}_j^{ref} \right). \quad (18)$$

Алгоритм включает два этапа. Сначала для определенного состава металла создается базовая модель. Для инициализации модели из термодинамических соображений вычисляются параметры $T_i^{max,initial}$ и T_i^{beg} . Эта модель обучается в течении 200000 эпох на нескольких кривых результатов ФГА одновременно. Скорость обучения изначально равна 10^{-5} , после чего каждые 25000 эпох умножается на 0.9. Затем для каждого нового полученного образца базовая модель дообучается в течении 5000

эпох для уточнения результата. Вследствие использования предобучения скорость применения алгоритма для новых образцов значительно увеличивается.

В статье [32] показано, что для более быстрой тренировки нейронных сетей учитывающих физическую информацию необходимо нормализовать моделируемое дифференциальное уравнение. Для того чтобы сделать это в данной работе при создании модели вычисляется V^{max} максимальное значение скорости выделения CO достигаемое на экспериментальных кривых. После этого все значения экспериментальных кривых делятся на V^{max} . Модель обучается с нормализованными экспериментальными кривыми. При получении окончательного результата, предсказания нейронной сети умножаются на V^{max} . В статье [32], также показано, что для более устойчивого и быстрого обучения нейронных сетей использующих физическую информацию требуется периодическая передискретизация области, на которой ищется функция. В статье [33] в ходе сравнения различных методов передискретизации было показано, что одними из наиболее эффективных методов передискретизации являются методы передискретизации на основе невязки дифференциального уравнения. В данной работе передискретизация проводилась с сохранением количества точек n на области определения, являющейся отрезком, каждую 1000 эпох по следующему алгоритму.

Сначала на отрезке равномерно берутся $n * 10$ точек и в них считается невязка выполнения дифференциального уравнения (7). Затем отрезок делится на $\frac{n}{10}$ частей, и для каждой части считается средняя невязка в точках находящихся в этой части. Далее в каждой части равномерно берутся точки в количестве пропорционально средней невязке дифференциального уравнения соответствующей этой части, но не менее одной.

4 Результаты

Алгоритм был протестирован на результатах ФГА для металлов марки ШХ-15. Для тестирования алгоритма было получено по 39 кривых результатов ФГА для образцовой ШХ-15 (ОШХ-15) и для заводской ШХ-15 (ЗШХ-15), которые отличаются по составу. Для обоих составов при помощи программы Oxide были рассчитаны температуры начала выделения угарного газа и температура максимума выделения угарного газа для всех типов оксидов, которые могут содержаться в данных металлах.

Полученные данные ФГА были подвергнуты предварительной обработке и предварительному выравниванию. При этом предварительное выравнивание происходило независимо для каждой группы каждого состава. Для каждого состава было отобрано по 6 кривых для обучения базовой модели. Также был зафиксирован список оксидов потенциально содержащихся в образцах металла данного состава и гиперпараметры

предложенного алгоритма. Гиперпараметры были выбраны следующими: $E_{scale} = 1$, $T_{scale}^{max} = 100$, $E^{initial} = 9 * 10^4$. Базовая модель обучалась в течение 200000 эпох. Итоговая функция потерь достигла порядка 10^{-2} . На рис. 8 изображен финальный результат работы базовой модели для ОШХ-15. Полученные базовые модели были протестированы на всех экс-

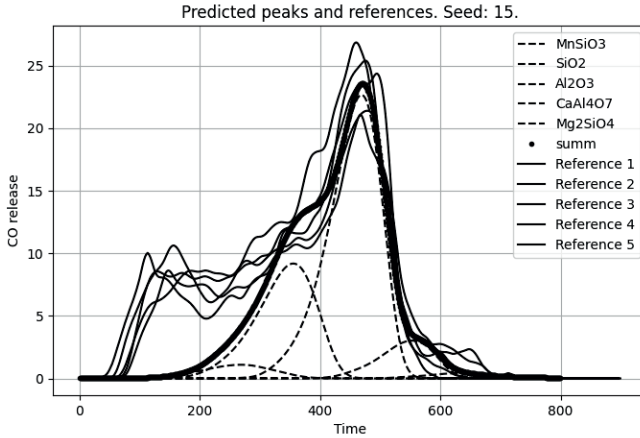


Рис. 8: Визуализация результата работы базового алгоритма для 6 параллельных результатов ФГА ОШХ-15.

периментальных кривых всех групп металла своего состава. Для каждой экспериментальной кривой была создана новая модель. При этом веса нейронной сети и значения дополнительных тренируемых параметров были инициализированы весами и значениями дополнительных тренируемых параметров соответствующих базовых моделей. Далее каждая модель обучалась в течении 5000 эпох с постоянной скоростью обучения $5 * 10^{-6}$. Таким образом, для каждой экспериментальной кривой было получено разложение на 8 или меньшее число пиков. Пример предсказания дообученного алгоритма приведен на рис. 9

Из полученного разбиения на пики было вычислено количество кислорода в каждом из типов включений. Для этого при помощи метода трапеций [34], были посчитаны площади под экспериментальной кривой и под каждым из пиков. Суммарная масса кислорода содержавшегося в образце известна, так как она измеряется при проведении ФГА. Тогда масса содержания кислорода во включениях каждого типа вычислялись из соображений, что количество кислорода связанного в данном оксидном включении относится к общему количеству кислорода так же, как

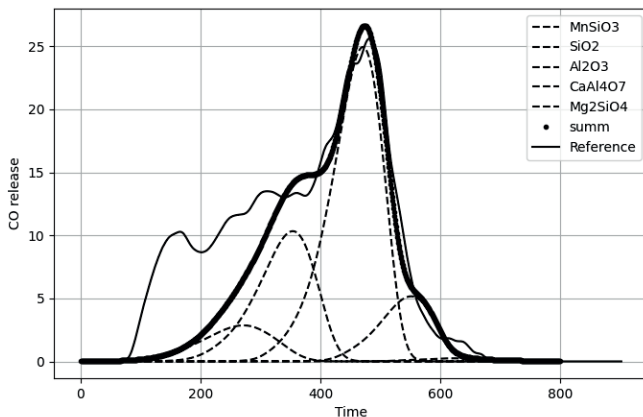


Рис. 9: Результаты дообучения на кривых ФГА для образцов из группы ОШХ-15-1

площадь под пиком, который соответствует выделению CO из оксидных включений этого типа, относится к площади под экспериментальной кривой.

Сравнение результатов экспертной оценки и результатов работы предложенного алгоритма для основной группы ОШХ-15 приведены на рис. 10. Средняя абсолютная ошибка предсказанного количества кислорода в оксиде Al_2O_3 составила 0.00012. Среднее квадратичное отклонение предсказанного количества кислорода связанного во включениях оксида Al_2O_3 менее 0.00001.

Для металла второго состава вместо количества кислорода в оксиде Al_2O_3 было посчитано количество кислорода в силикатах, алюминатах и шпинели. Средние абсолютные ошибки предсказанного количества кислорода в силикатах, алюминатах и шпинели составили 0.0002, 0.0003 и 0.0002 соответственно. Среднее квадратичное отклонение предсказанного количества кислорода связанного во включениях алюминатов составила 0.0005.

5 Заключение

Был разработан алгоритм, позволяющий определить для каждого типа оксидного включения скорость выделения CO при неизотермическом плавлении и массу связанного кислорода по кривым зависимости скорости выделения CO из образца, полученным при фракционном газовом анализе. Разработанный алгоритм основывается на концепции нейронных сетей, учитывающих физическую информацию. Это позволяет при

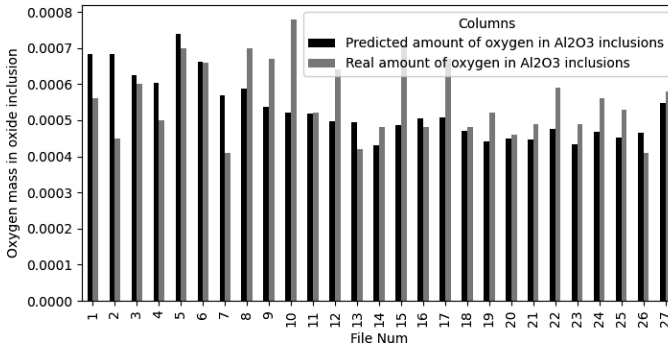


Рис. 10: Сравнение экспертной оценки количества кислорода связанного во включениях оксида Al_2O_3 и его количества предсказанного предложенным алгоритмом для ОШХ-15-1. В колонках для каждого образца последовательно приведены количество кислорода во включениях Al_2O_3 предсказанное предложенным алгоритмом и его количество, посчитанное в при помощи экспертной оценки.

решении задачи использовать модель зависимости скорости выделения CO от времени из отдельного типа оксидных включений, представленную в виде дифференциального уравнения. Данный алгоритм был реализован на языке Python с использованием пакетов DeepXDE, numpy и PyTorch. В ходе тестирования на двух металлах разного состава была показана практическая применимость разработанного алгоритма.

Авторские декларации

Финансирование

Дополнительные источники финансирования отсутствуют.

Доступность данных и программного кода

Программный код реализующий предложенный алгоритм: <https://github.com/Mitdia/OxSepDL>.

Конфликт интересов

Отсутствует.

Вклад авторов

Д. Д. Кнорре – разработка алгоритма, тестирование алгоритма, написание текста статьи. А. С. Крылов – разработка математических моделей и алгоритма, написание текста статьи. Ю. К. Фельдман – получение

экспериментальных данных, написание текста статьи. К. В. Григорович – разработка математических моделей, получение экспериментальных данных, написание текста статьи.

Список литературы

- [1] *Webler B. A., Pistorius P. C.* A Review of Steel Processing Considerations for Oxide Cleanliness // *Metallurgical and Materials Transactions B.* — 2020. — Vol. 51, no. 6. — Pp. 2437–2452. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-020-01949-y>.
- [2] *Li Hao, Ren Qiang, Zhang Lifeng.* Effects of Cerium on Non-metallic Inclusions and Rolling Contact Fatigue Life of a High-Carbon Chromium Bearing Steel // *Metallurgical and Materials Transactions A.* — 2022. — Vol. 54, no. 1. — P. 167–178. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s11661-022-06856-2>.
- [3] Influence of nonmetallic inclusion characteristics on the mechanical properties of rail steel / S. K. Dhua, Amitava Ray, S. K. Sen et al. // *Journal of Materials Engineering and Performance.* — 2000. — Vol. 9, no. 6. — Pp. 700–709. — URL: <https://doi.org/10.1361/105994900770345584>.
- [4] *Beretta Stefano, Anderson Clive, Murakami Yukiitaka.* Extreme value models for the assessment of steels containing multiple types of inclusion // *Acta Materialia.* — 2006. — Vol. 54, no. 8. — P. 2277–2289. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2006.01.016>.
- [5] *Григорович К. В., Красовский П. В., Трушников П. В.* Анализ неметаллических включений — основа контроля качества стали и сплавов // *Уральский государственный технический университет.* — 2002. — Pp. 133–142. — URL: <http://hdl.handle.net/10995/57213>.
- [6] *Guldner W.G.* The determination of oxygen, hydrogen, nitrogen and carbon in metals: A review // *Talanta.* — 1961. — Vol. 8, no. 4. — Pp. 191–202. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0039914061800647>.
- [7] *Grigorovitch K. V., Krasovskii P. V., Krylov A. S.* Fractional Gas Analysis-Basic Principles and Application in Steel Quality // CHEMISTS CONFERENCE. — 1999. — Pp. 249–256.
- [8] Обработка и интерпретация результатов фракционного газового анализа / К. В. Григорович, П. В. Красовский, С. А. Исаков et al. // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов.* — 2002. — Vol. 68.

— Pp. 3–9.

- [9] *Excoffier J. L., Guiochon G.* Automatic peak detection in chromatography // *Chromatographia*. — 1982. — Vol. 15, no. 9. — P. 543–545. — URL: <http://dx.doi.org/10.1007/BF02280372>.
- [10] *Park Jeffrey, Lindberg Craig R., Vernon Frank L.* Multitaper spectral analysis of high-frequency seismograms // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. — 1987. — Vol. 92, no. B12. — P. 12675–12684. — URL: <http://dx.doi.org/10.1029/JB092iB12p12675>.
- [11] *Cardoso J.-F.* Blind signal separation: statistical principles // *Proceedings of the IEEE*. — 1998. — Vol. 86, no. 10. — Pp. 2009–2025.
- [12] *Erny Guillaume Laurent, Moeenfarid Marzieh, Alves Arminda.* Iterative Multivariate Peaks Fitting—A Robust Approach for The Analysis of Non-Baseline Resolved Chromatographic Peaks // *Separations*. — 2021. — Vol. 8, no. 10. — P. 82000E. — URL: <https://www.mdpi.com/2297-8739/8/10/178>.
- [13] *Cai Zhijian, Wu Jianhong.* An automatic peak detection algorithm for Raman spectroscopy based on wavelet transform // 2011 International Conference on Optical Instruments and Technology: Optoelectronic Imaging and Processing Technology / Ed. by Toru Yoshizawa, Ping Wei, Jesse Zheng; International Society for Optics and Photonics. — Vol. 8200. — SPIE, 2011. — P. 82000E. — URL: <https://doi.org/10.1117/12.904862>.
- [14] Iterative peak-fitting of frequency-domain data via deep convolution neural networks / Seong-Heum Park, Hyeongseon Park, Hyunbok Lee, Heung-Sik Kim // *Journal of the Korean Physical Society*. — 2021. — Vol. 79, no. 12. — Pp. 1199–1208. — URL: <https://doi.org/10.1007%2Fs40042-021-00346-1>.
- [15] DEEP picker is a deep neural network for accurate deconvolution of complex two-dimensional NMR spectra / Da-Wei Li, Alexandar L. Hansen, Chunhua Yuan et al. // *Nature Communications*. — 2021. — Vol. 12, no. 1. — P. 5229. — URL: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-25496-5>.
- [16] Peak Detection and Baseline Correction Using a Convolutional Neural Network / Mikkel N. Schmidt, Tommy S. Alström, Marcus Svendstorp, Jan Larsen // ICASSP 2019 - 2019 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). — 2019. — Pp. 2757–2761.

- [17] Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next / Salvatore Cuomo, Vincenzo Schiano Di Cola, Fabio Giampaolo et al. // *Journal of Scientific Computing*. — 2022. — Vol. 92, no. 3. — P. 88. — URL: <https://doi.org/10.1007/s10915-022-01939-z>.
- [18] Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: a review / Shengze Cai, Zhiping Mao, Zhicheng Wang et al. // *Acta Mechanica Sinica*. — 2021. — Vol. 37, no. 12. — Pp. 1727–1738. — URL: <https://doi.org/10.1007/s10409-021-01148-1>.
- [19] Physics-Informed Neural Networks for Heat Transfer Problems / Shengze Cai, Zhicheng Wang, Sifan Wang et al. // *Journal of Heat Transfer*. — 2021. — Vol. 143, no. 6. — Pp. 060801–1. — URL: <http://dx.doi.org/10.1115/1.4050542>.
- [20] *Voytan Dimitri, Sen Mrinal K.* Wave propagation with physics informed neural networks // SEG Technical Program Expanded Abstracts 2020. — Society of Exploration Geophysicists, 2020. — P. e2021JB023120. — URL: <http://dx.doi.org/10.1190/segam2020-3425406.1>.
- [21] Physics-informed neural networks for inverse problems in supersonic flows / Ameya D. Jagtap, Zhiping Mao, Nikolaus Adams, George Em Karniadakis // *Journal of Computational Physics*. — 2022. — Vol. 466. — P. 111402. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999122004648>.
- [22] A-PINN: Auxiliary physics informed neural networks for forward and inverse problems of nonlinear integro-differential equations / Lei Yuan, Yi-Qing Ni, Xiang-Yun Deng, Shuo Hao // *Journal of Computational Physics*. — 2022. — Vol. 462. — P. 111260. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111260>.
- [23] *Martire Antonio Luciano, Congedo Maria Alessandra, Cenci Marisa.* Fractional Volterra Integral Equations: A Neural Network Approach. — Roma TrE-Press, 2022. — Vol. 1. — Pp. 887–897.
- [24] Physics-informed neural networks for data-driven simulation: Advantages, limitations, and opportunities / Félix Fernández de la Mata, Alfonso Gijón, Miguel Molina-Solana, Juan Gómez-Romero // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 2023. — Vol. 610. — P. 128415. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2022.128415>.
- [25] DeepXDE: A Deep Learning Library for Solving Differential Equations / Lu Lu, Xuhui Meng, Zhiping Mao, George Em Karniadakis // *SIAM*

- Review.* — 2021. — Vol. 63, no. 1. — Pp. 208–228. — URL: <https://doi.org/10.1137/19M1274067>.
- [26] *Imambi Sagar, Prakash Kolla Bhanu, Kanagachidambaresan G. R.* PyTorch // EAI/Springer Innovations in Communication and Computing. — Springer International Publishing, 2021. — P. 87–104. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-57077-4_10.
- [27] Application of Fractional Gas Analysis to Control the Production of 22GYu Steel / Morozov, A. O., Shuyanov, A. S., Lukin, A. S. et al. // *Russian Metallurgy (Metally)*. — 2022. — Vol. 2022, no. 7. — P. 764–769. — URL: <http://dx.doi.org/10.1134/S0036029522070084>.
- [28] *Крылов А. С.* Математическое моделирование и компьютерный анализ жидких металлических систем. — 2009.
- [29] *Coakley K.J., Hale P.* Alignment of noisy signals // *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*. — 2001. — Vol. 50, no. 1. — Pp. 141–149.
- [30] *Kingma Diederik P., Ba Jimmy.* Adam: A Method for Stochastic Optimization. — 2014. — URL: <https://arxiv.org/abs/1412.6980>.
- [31] *Glorot Xavier, Bengio Yoshua.* Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks // Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics / Ed. by Yee Whye Teh, Mike Titterton. — Vol. 9 of *Proceedings of Machine Learning Research*. — Chia Laguna Resort, Sardinia, Italy: PMLR, 2010. — Pp. 249–256. — URL: <https://proceedings.mlr.press/v9/glorot10a.html>.
- [32] An Expert's Guide to Training Physics-informed Neural Networks / Sifan Wang, Shyam Sankaran, Hanwen Wang, Paris Perdikaris. — 2023. — URL: <https://arxiv.org/abs/2308.08468>.
- [33] A comprehensive study of non-adaptive and residual-based adaptive sampling for physics-informed neural networks / Chenxi Wu, Min Zhu, Qinyang Tan et al. // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 2023. — Vol. 403. — P. 115671. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2022.115671>.
- [34] *Davis P.J., Rabinowitz P., Rheinbolt W.* Methods of Numerical Integration. Computer Science and Applied Mathematics. — Elsevier Science, 2014. — Pp. 51–57. — URL: <https://books.google.ru/books?id=mbLiBQAAQBAJ>.