

Метод определения оксидного состава металла по данным неизотермического газового анализа

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

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

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

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

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

Аннотация

Производство металлов требует точного контроля содержания оксидных включений, которые существенно влияют на механические и эксплуатационные свойства материалов. Традиционные методы анализа не всегда позволяют однозначно определить состав и распределение оксидов, что делает актуальной разработку новых подходов к интерпретации данных фракционного газового анализа (ФГА). В данной работе предложен автоматизированный метод определения оксидного состава металлов на основе данных ФГА. Метод основан на математической модели, описывающей процесс выделения угарного газа (CO) из оксидных включений при неизотермическом плавлении образца. Для решения задачи оптимизации параметров модели использован модифицированный метод градиентного спуска (RMSProp) с автоматическим дифференцированием, что позволяет эффективно минимизировать функцию потерь, учитывающую как точность аппроксимации экспериментальных данных, так и физические ограничения модели.

Тестирование метода проведено на реальных данных анализа образцов стали марки ШХ-15. Результаты показали хорошее соответствие с экспертной оценкой содержания оксидов, что подтверждает применимость метода в промышленных условиях.

Ключевые слова: Фракционный газовый анализ, Оксидные включения, Градиентный спуск, Автоматическое дифференцирование.

1 Введение

Производство металлов сопровождается выделением газовых примесей, таких как кислород, что приводит к образованию неметаллических включений. В процессе затвердевания они распределяются в металле неравномерно (см. Рис. 1). Твёрдые неметаллические включения, образующиеся при производстве, могут стать причиной засоров, что затрудняет нормальное движение расплава в процессе переработки металла [1]. В готовых изделиях эти включения могут проявляться в виде дефектов на поверхности [2], приводить к возникновению усталостных трещин [3] и снижению устойчивости к коррозии [4].

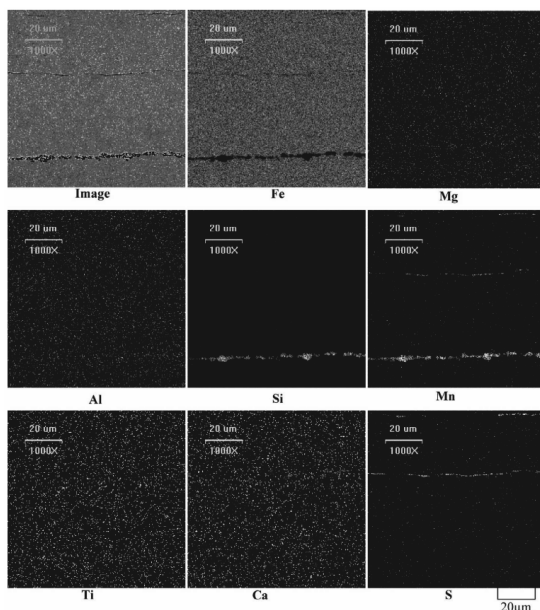


Рис. 1: Изображение "нитей" неметаллических включений в составе образца, полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа и рентгеновской спектроскопии [5]

Знание химического состава сплава не всегда является достаточным для определения его качества. Это связано с тем, что различные виды оксидных включений могут существенно различаться по своим свойствам и

по-разному влиять на характеристики металла. Поэтому для более точной оценки качества металла важно не только учитывать химический состав, но и анализировать формы, в которых присутствуют примеси [6]. В настоящий момент разработано множество методов детекции и анализа оксидных включений в стали [7] [8], в их числе фракционный газовый анализ, на интерпретации результатов которого концентрируется данная работа.

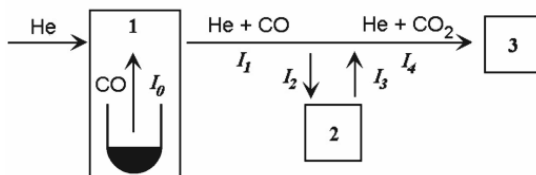


Рис. 2: Схема газоанализатора: 1. Печь анализатора. 2. Ячейка, где происходит доокисление до CO_2 . 3. Анализатор. [9]

Метод фракционного газового анализа (ФГА) [10] представляет собой модификацию метода восстановительного плавления в графитовом тигле в токе несущего газа при заданной линейной скорости нагрева образца [11]. На Рис. 2 представлена схема проведения ФГА. Для выполнения фракционного газового анализа образец металла помещается в графитовый тигель и размещается в печи. Затем печь нагревается при постепенном увеличении температуры в потоке газа-носителя (обычно гелия). При повышении температуры расплава оксидные включения восстанавливаются углеродом, и кислород экстрагируется из расплава в виде окиси углерода (1), при этом газоанализатор фиксирует кривую газовыделения из образца в зависимости от температуры расплава.



В приборе LECO TC600 также предусмотрено доокисление окиси углерода (CO) до двуокиси углерода (CO_2). Скорость поступления CO_2 фиксируется при помощи метода инфракрасной абсорбционной спектроскопии. Помимо этого, в каждый момент времени прибор фиксирует температуру образца. Таким образом, в результате ФГА получается зависимость скорости выделения CO_2 и температуры от времени. Далее восстанавливается зависимость скорости выделения CO из образца от температуры [11]. Полученная кривая является характеристикой оксидных включений данного образца стали (см. Рис. 3).

Сама по себе, зависимость скорости выделения CO из образца от времени не дает информации о типах оксидных включений. Метод анализа основан на различии температурных зависимостей термодинамической прочности оксидов, в которых находится основная часть связанного в

металле кислорода. Зная температурные характеристики конкретных включений, а также введя функцию выделения CO из каждого оксида по отдельности, можно восстановить содержание оксидов в образце, приближая общую кривую выделения суммой кривых отдельных оксидных включений.

Для интерпретации результатов ФГА, в работе [12] был предложен алгоритм для их предварительной обработки, а также метод разложения функции зависимости скорости выделения CO из образца от времени из всего образца на сумму функций зависимости выделения CO от времени из каждого из оксидных включений. Для моделирования процесса выделения кислорода из оксидного включения в образце металла при неизотермическом плавлении, использовано дифференциальное уравнение (2),

$$V'(t) = V(t)(f'(t) - e^{f(t)}) \quad (2)$$

$V(t)$ – функция зависимости скорости выделения CO из образца,

$$f(t) = K - \frac{E}{T(t)}$$

$T(t)$ – функция зависимости температуры от времени

K, E – константы

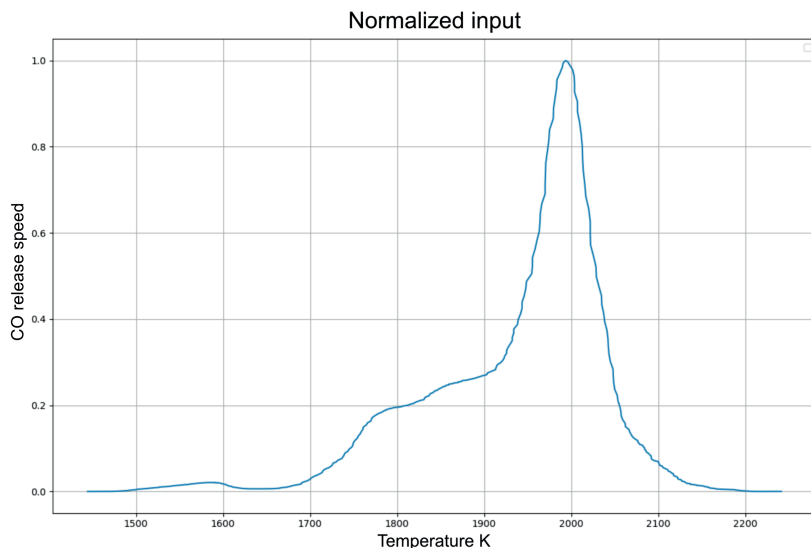


Рис. 3: Пример зависимости полученной в результате ФГА

Алгоритм, описанный в [12], не способен однозначно определить, какие пики соответствуют выделению CO из тех или иных оксидных включений, поэтому в работе [13] был предложен метод на основе нейронных сетей, учитывающих физическую информацию [14], позволяющий строить приближение суммарной кривой выделения, одновременно учитывая (2) и находя для каждого оксида соответствующие параметры K и E .
Преимущества метода:

- Возможность работы с моделями, не имеющими аналитического решения.
- Интерпретируемость полученного разложения.
- Метод может учитывать дополнительные условия через модификацию функции потерь.

Недостатки метода:

- Длительное время обучения, которое возрастает с увеличением числа оксидов.
- Необходимость создания новой модели для работы с новым набором оксидов.

В данной работе предложен подход, который решает проблемы производительности и масштабируемости, но при этом ограничен использованием аналитических моделей. Такое упрощение приводит к задаче представления сигнала в виде суммы функций специального вида, которая встречается в задачах разделения сигнала [15], при анализе хроматограмм и сейсмограмм [16, 17]. Для решения этой задачи существует множество классических подходов [18, 19], однако в данной работе необходимо учитывать дополнительные условия регулярности, из-за чего используемый в данной работе алгоритм основан на методе градиентного спуска [20].

2 Описание метода

Для решения данной задачи была использована модификация метода градиентного спуска [20] – RMSProp, для оптимизации функции потерь, учитывающей характеристики каждого оксида по отдельности и точность приближения их суммарной функции выделения. Для определения градиента использовался метод автоматического дифференцирования. Далее будет приведено подробное описание использованной модели, метода оптимизации, обучаемых параметров и структуры функции потерь.

2.1 Предобработка входных данных

Этот этап состоит в следующем:

1. Кривая выделения CO из образца сглаживается с помощью свертки с функцией Гаусса

2. Все значения приводятся в диапазон от 0 до 1 путем деления на максимальное значение скорости выделения. При этом данное значение сохраняется для использования при получения итоговых результатов.
3. В силу того, что используемая модель дает функции плохо приближающие высокочастотную информацию, можно использовать разрежение сетки, на которой задана кривая выделения CO из образца. Эксперименты показали, что результат работы алгоритма меняется в пределах погрешности прибора при уменьшении количества точек в 20 раз, что дает прирост в скорости работы примерно в 1,5 раза.

2.2 Математическая модель выделения CO

Как и в работе [12], в данном исследовании используется разработанная в [9] модель кинетики выделения CO из металлического образца. Модель описывается дифференциальным уравнением:

$$\frac{dF(t)}{dt} = F(t) \left(\frac{df(t)}{dt} - e^{f(t)} \right) \quad (3)$$

где:

- $F(t)$ – скорость выделения CO из образца (моль/с)
- $T(t)$ – температурный профиль (К)
- $f(t) = K - \frac{E}{T(t)}$ – вспомогательная функция
- K , E – параметры модели, специфичные для каждого типа оксида

Для решения уравнения (3) формулируется задача Коши с начальным условием:

$$\begin{cases} \frac{dF(t)}{dt} = F(t) \left(\frac{df(t)}{dt} - e^{f(t)} \right) \\ F(t_0) = V_0 \end{cases} \quad (4)$$

Как показано в [9], аналитическое решение этой задачи имеет вид:

$$F(t) = V_0 \exp \left[f(t) - f(t_0) - \int_{t_0}^t e^{f(\tau)} d\tau \right] = V_0 \exp [I(t) - I(t_0)] \quad (5)$$

где:

$$I(t) = f(t) - e^K \left(te^{E/t} + E \cdot \text{Ei} \left(-\frac{E}{t} \right) \right) \quad (6)$$

Здесь $\text{Ei}(x)$ – интегральная показательная функция. Параметр K выражается через температуру T_m в точке максимума t_m функции $V(t)$:

$$K = \frac{E}{T(t_m)} + \ln \left(\frac{ET'(t_m)}{T^2(t_m)} \right) \quad (7)$$

2.3 Параметризация и выход модели

Как уже описано выше, главный принцип, лежащий в основе фракционного газового анализа, это различие температурных характеристик для разных оксидов, благодаря чему и становится возможным разделение кривой выделения CO из образца на составляющие. На вход алгоритму, помимо зависимости скорости выделения CO из образца от температуры, поступает список возможных оксидов, а также по два температурных параметра для каждого из них: T^{beg} и T^{max} . T^{beg} задает порог, до которого выделение кислорода из оксида почти не происходит. T^{max} это температура, при которой достигается максимальная интенсивность выделения кислорода из оксида.

Теперь рассмотрим параметры необходимые для описания модели. Для того чтобы полностью задать функцию выделения для одного оксида по (5) необходимо указать значения параметров V_0 , t_0 , E и K . Но если посмотреть на формулу (7) для параметра K , то можно увидеть, что он однозначно задается через значения параметров T^{max} и E . В качестве t_0 можно использовать любой из параметров T^{max} или T^{beg} , но при реализации алгоритма оказалось удобнее использовать первый, тогда в качестве V_0 будет выступать максимальная скорость выделения V_{max} .

T^{max} и T^{beg} , зависят от химического состава, и их значения даже в рамках одной марки стали могут варьироваться в пределах до 30 К. Кроме этих параметров дополнительно вводится общее смещение температуры T^{global} . Для того чтобы ограничить диапазон изменения температурных параметров, каждый из них задается тремя значениями: значение, полученное при инициализации T_{init} , обучаемый параметр δT и максимальное допустимое отклонение δT_{max} . Итоговое значение параметра вычисляется по формуле (8).

$$T = T_{init} + \delta T_{max} \cdot \tanh(\delta T) \quad (8)$$

Таким образом, итоговая модель имеет следующий набор параметров:

- Обучаемые параметры δT^{max} , δT^{beg} , E и V_{max} для каждого оксида
- Обучаемый параметр δT^{global}
- Необучаемые параметры T_{init}^{max} , δT_{max}^{max} , T_{init}^{beg} и δT_{max}^{beg} для каждого оксида
- Необучаемый параметр δT_{max}^{global} (T_{init}^{global} не используется и всегда равен 0)

Для получения значений T_{init}^{max} , T_{init}^{beg} используется соответствующий алгоритм из [12]. δT_{max}^{max} и δT_{max}^{beg} являются гиперпараметрами.

2.4 Функция потерь

Введем следующие обозначения:

- N_{oxides} — количество рассматриваемых типов оксидных включений;

- $F^i(t)$ — функция скорости выделения CO для i -го оксида, вычисляемая по формуле (5);
- $\{t_j\}_{j=1}^{N_{\text{grid}}}$ — дискретная температурная сетка;
- $F(t)$ — экспериментальная кривая выделения CO из образца;

Функция потерь $\mathcal{L}$ представляет собой взвешенную сумму четырех компонент:

1. **Основная невязка** ($\mathcal{L}_{\text{ref}}$):

$$\mathcal{L}_{\text{ref}} = \frac{1}{N_{\text{grid}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{grid}}} \left| F(t_j) - \sum_{i=1}^{N_{\text{oxides}}} F^i(t_j) \right| \quad (9)$$

Обеспечивает минимальное отклонение суммарной модели от экспериментальных данных.

2. **Термодинамический штраф** ($\mathcal{L}_{\text{beg}}$):

$$\mathcal{L}_{\text{beg}}^i = \frac{1}{N_{\text{grid}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{grid}}} \frac{F^i(t_j)}{1 + e^{t_j - T_{\text{beg}}^i}} \quad (10)$$

$$\mathcal{L}_{\text{beg}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{oxides}}} \mathcal{L}_{\text{beg}}^i \quad (11)$$

Реализует физическое ограничение на выделение CO при температурах ниже T_{beg}^i .

3. **Регуляризация сдвига** ($\mathcal{L}_{\text{shift}}$):

$$\mathcal{L}_{\text{shift}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{oxides}}} |\delta T_{\text{beg}}^i| \quad (12)$$

Контролирует величину отклонения параметра T_{beg}^i от начального значения.

4. **Парсимониальная регуляризация** ($\mathcal{L}_{\text{use}}$):

$$\mathcal{L}_{\text{use}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{oxides}}} w_{\text{use}}^i \cdot V_{\text{max}}^i \quad (13)$$

Стимулирует использование минимально необходимого количества компонент. w_{use}^i - сила штрафа для i -го оксида, задание разных штрафов для оксидов позволяет передавать априорные знания в модель.

Итоговая функция потерь представляет собой взвешенную сумму всех компонент:

$$\mathcal{L} = w_{\text{ref}}\mathcal{L}_{\text{ref}} + w_{\text{beg}}\mathcal{L}_{\text{beg}} + w_{\text{shift}}\mathcal{L}_{\text{shift}} + \mathcal{L}_{\text{use}} \quad (14)$$

где w_{ref} , w_{beg} и w_{shift} — регулируемые весовые коэффициенты.

Ключевые особенности:

- Сочетание точности аппроксимации с физическими ограничениями.
- Учет термодинамических характеристик оксидов.
- Возможность включения априорных знаний через весовые коэффициенты.
- Дифференцируемость всех компонент, что важно для методов градиентной оптимизации.

2.5 Алгоритм оптимизации параметров

2.5.1 Инициализация параметров

Процесс оптимизации начинается с этапа предобработки и инициализации параметров:

- Исходная зависимость скорости выделения CO подвергается предварительной обработке (сглаживание, нормировка)
- Температурные параметры $T_{\text{init}}^{\text{max}}$ и $T_{\text{init}}^{\text{beg}}$ инициализируются с использованием алгоритма из [12]
- Параметры $\delta T_{\text{max}}^{\text{beg}}$, $\delta T_{\text{max}}^{\text{global}}$ и E устанавливаются пользователем
- Начальное значение V_{max} определяется как значение предобработанной кривой в точке $T_{\text{init}}^{\text{max}}$

2.5.2 Процесс оптимизации

После инициализации начального состояния алгоритма запускается процесс оптимизации функции потерь, который состоит из следующих пунктов:

1. Находится значение функции потерь и вычисляется значение градиента, для этого используется метод автоматического дифференцирования, реализованный в библиотеке PyTorch.
2. По вычисленному значению градиента обновляются параметры модели, в данном случае использовался метод RMSProp с моментом. Выражения для t -й итерации метода приведены в (15). Здесь $f(\theta)$ - оптимизируемая функция, θ_t - параметры модели на t -й итерации, α - коэффициент сглаживания, μ - множитель момента, γ - шаг обучения.

$$\begin{aligned}
g_t &= \nabla_{\theta} f(\theta_{t-1}) \\
v_t &= \alpha v_{t-1} + (1 - \alpha) g_t^2 \\
\mathbf{b}_t &= \mu \mathbf{b}_{t-1} + \frac{g_t}{\sqrt{v_t} + \epsilon} \\
\theta_t &= \theta_{t-1} - \gamma \mathbf{b}_t
\end{aligned} \tag{15}$$

Выбор метода обусловлен особенностями заданной функции потерь:

- Большое количество локальных минимумов, что усиливает зависимость результата работы алгоритма от начального приближения.
- При некоторых значениях параметров (в частности при малых скоростях выделения) функция потерь имеет большую норму градиента, что ведет к нестабильности обучения и переполнениям.

RMSProp корректирует шаг обучения для каждого параметра в зависимости от среднеквадратичного значения прошлых градиентов. Этот подход позволяет бороться с большими градиентами и может работать с параметрами разного масштаба, а добавление к нему момента сглаживает проблему локальных минимумов и ускоряет сходимость.

3. Использование RMSProp не до конца решает проблему с особенностями при малых V_{max} , так как может приводить к долгой сходимости, поэтому каждые несколько итераций V_{max}^i для каждого оксида сравнивается со значением $\hat{V}_{min}^i$, который зависит от значения функции выделения CO из образца в соответствующей точке T_{max}^i как показано в формуле (16).

$$\hat{V}_{min}^i = \min(V_{min}, v_{min} \cdot F(T_{max}^i)) \tag{16}$$

V_{min} — глобальный порог, v_{min} — коэффициент для вычисления относительного порога. Если V_{max}^i оказалось меньше $\hat{V}_{min}^i$, то данный оксид отбрасывается и дальнейшая оптимизация идет без него.

4. Процесс оптимизации останавливается либо по достижении заданного числа итераций, либо когда значения параметров стабилизируются 2.5.3.

Использование RMSProp с механизмом отсева незначимых оксидов позволяет:

- Эффективно работать с параметрами разного масштаба.
- Избегать переполнения при больших градиентах.
- Автоматически определять значимые компоненты смеси.
- Обеспечивать быструю сходимость даже при наличии локальных минимумов.

2.5.3 Критерий остановки

Стабилизация параметров определяется следующим образом:

1. Для каждого параметра вычисляется скользящее среднее:

$$M_t = \frac{1}{k} \sum_{n=t-k+1}^t V_{\max}^i(n)$$

2. Анализируется направление изменения:

$$\text{sign}(M_t - M_{t-1})$$

3. Параметр считается стабильным, если направление меняется чаще заданного порога (колебания около минимума).
4. Если направление не меняется в течение заданного числа итераций, то параметр снова считается нестабилизировавшимся.
5. Оптимизация завершается при стабилизации всех параметров.

2.6 Графический интерфейс

Для удобства работы с алгоритмом был разработан специализированный графический интерфейс, предоставляющий оператору следующие возможности:

1. Гибкая настройка параметров анализа:
 - Регулировка гиперпараметров алгоритма (коэффициенты обучения, моменты)
 - Задание значений параметров для первого приближения
 - Управление процессом оптимизации (число итераций, критерии остановки)
 - Настройка параметров инициализации моделей для различных типов оксидов
 - Контроль параметров предобработки входных данных (степень сглаживания, разрежение)
 - Настройка пороговых значений для автоматического отсева неизвестных компонентов
2. Управление приоритетами анализа:
 - Задание весовых коэффициентов для различных типов оксидных включений
 - Возможность исключения определенных оксидов из анализа
3. Работа с составом образца:
 - Ввод химического состава анализируемого материала
 - Автоматический расчет начальных параметров температурных характеристик

4. Визуализация и анализ результатов:

- Анимированная демонстрация сходимости алгоритма
- Сравнение экспериментальных данных с аппроксимирующей кривой
- Табличное представление количественных результатов

5. Шаблоны и профили настроек:

- Создание и сохранение пользовательских наборов параметров
- Быстрое применение стандартных конфигураций для типовых задач
- Импорт/экспорт настроек для воспроизводимости результатов

Ключевым преимуществом интерфейса является возможность работы в двух режимах:

- Для опытных пользователей - полный доступ ко всем настройкам и параметрам
- Для рядовых операторов - автоматический режим с предустановленными оптимальными параметрами

Интерфейс реализован с использованием современных фреймворков, что обеспечивает его кроссплатформенность и простоту интеграции в существующие системы анализа.

3 Результаты

Для количественной оценки содержания кислорода в каждом оксиде вычисляется площадь под соответствующей кривой выделения CO . Затем результаты группируются по типам оксидов (силикаты, алюминаты, шпинель) и сравниваются с экспертными данными. Алгоритм тестировался на данных для 3 образцов стали марки ШХ-15, параметры эксперимента приведены в Приложении А. Ниже приведены примеры работы алгоритма (см. Рис. 4, 5, 6), а также сравнение полученных результатов с оценкой экспертов из Института металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН (см. Таблицы 1, 2, 3). Как видно из таблиц, результаты метода хорошо согласуются с экспертными оценками, особенно для алюминатов, где расхождения не превышают 10%. Для силикатов и шпинели наблюдаются небольшие отклонения, которые, однако, находятся в пределах погрешности прибора, которая может достигать 1 ppm.

Таблица 1: Сравнение содержания оксидных включений (в ppm), полученного методом ФГА и экспертной оценкой, для образца №1

Метод получения оценки	Силикаты, ppm	Алюминаты, ppm	Шпинель, ppm
Эксперты	2.8	21.0	1.1
Разработанный метод	2.3	22.1	1.8

Таблица 2: Сравнение содержания оксидных включений (в ppm), полученного методом ФГА и экспертной оценкой, для образца №2

Метод получения оценки	Силикаты, ppm	Алюминаты, ppm	Шпинель, ppm
Эксперты	1.4	26.4	0.5
Разработанный метод	2.0	25.5	0.9

Таблица 3: Сравнение содержания оксидных включений (в ppm), полученного методом ФГА и экспертной оценкой, для образца №3

Метод получения оценки	Силикаты, ppm	Алюминаты, ppm	Шпинель, ppm
Эксперты	0.9	21.8	0.0
Разработанный метод	2.0	20.0	0.0

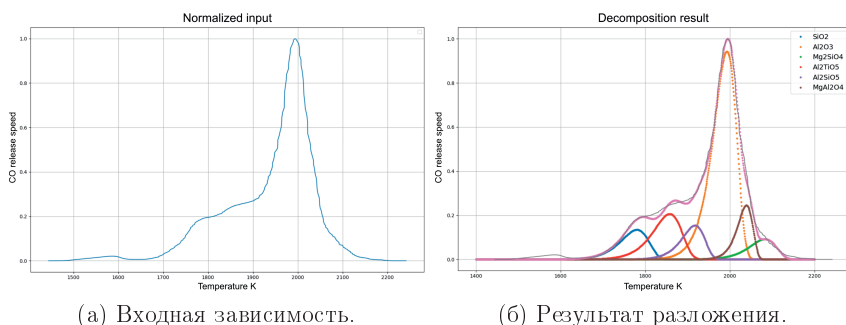


Рис. 4: Пример разложения кривой выделения CO на компоненты, соответствующие разным оксидам (образец №1).

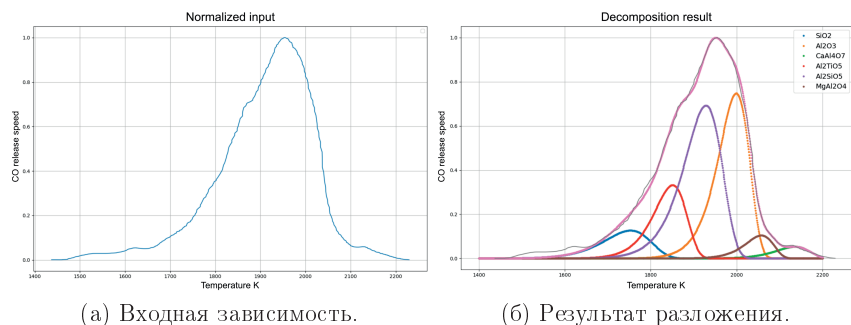


Рис. 5: Пример разложения кривой выделения CO на компоненты, соответствующие разным оксидам (образец №2).

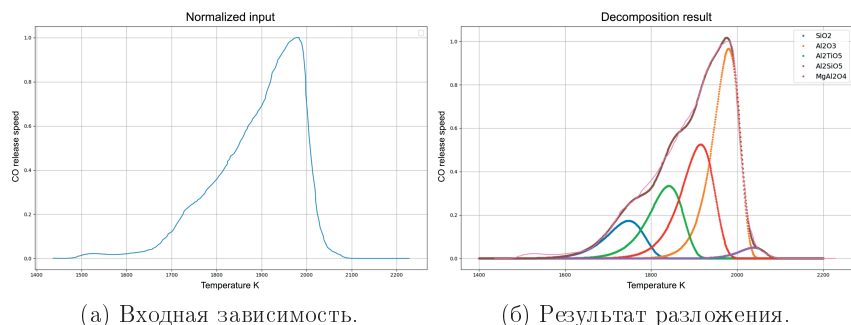


Рис. 6: Пример разложения кривой выделения CO на компоненты, соответствующие разным оксидам (образец №3).

4 Заключение

В данной работе предложен автоматизированный метод определения оксидного состава металлов на основе данных фракционного газового анализа (ФГА). Метод основан на математической модели, описывающей процесс выделения угарного газа (CO) из оксидных включений, и использует модифицированный алгоритм градиентного спуска (RMSProp) для оптимизации параметров модели. Основные преимущества метода включают интерпретируемость результатов и возможность учета физических ограничений.

Тестирование метода на образцах стали марки ШХ-15 показало хорошее соответствие с экспертной оценкой содержания оксидов, что подтверждает его применимость в промышленных условиях. Однако

метод имеет ряд ограничений, таких как зависимость от начального приближения и необходимость использования аналитических моделей.

В дальнейшем планируется интеграция метода с другими методами анализа, такими как оптико-эмиссионная спектрометрия с разрядом в атмосфере аргона, для повышения точности оценок.

Авторские декларации

Финансирование

Дополнительные источники финансирования отсутствуют.

Доступность данных и программного кода

Программный код, реализующий предложенный алгоритм
<https://github.com/Doodox098/Oxides>

Конфликт интересов

Отсутствует.

Вклад авторов

Д. С. Токарь – 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.

Приложение А Параметры вычислительного эксперимента

Все результаты, представленные в разделе 3, были получены при следующих настройках алгоритма:

А.0.1 Параметры предобработки данных

- Коэффициент прореживания временной сетки: 20;
- Ширина ядра Гауссова сглаживания: 50 точек;

А.0.2 Критерии остановки

- Размер окна для скользящего среднего: 20 итераций;
- Число стабильных итераций для сходимости: 5;
- Порог смены направления: 3 итерации;
- Минимальное число итераций: 100;
- Максимальное число итераций: 1500;

А.0.3 Настройки оптимизатора RMSProp

- Шаг обучения (γ): 1×10^{-3} ;
- Коэффициент сглаживания (α): 0.99;
- Момент (μ): 0.7;

А.0.4 Инициализация параметров

- $E_{init} = 8 \times 10^4$
- Допустимые вариации температур:
 - Для T^{beg} : ± 20 К
 - Для T^{max} : ± 30 К
 - Общий сдвиг: ± 50 К

А.0.5 Веса функция потерь

В таблице А1 приведены веса функции потерь.

Таблица А1: Вес коэффициентов функции потерь

Компонента	Вес	Примечание
Основная невязка (w_{ref})	10.0	
Термодинамический штраф (w_{beg})	50.0	
Регуляризация сдвига (w_{shift})	50.0	
Парсимониальная регуляризация	0.002	Для Al_2O_3 и SiO_2
Парсимониальная регуляризация	0.15	Для прочих оксидов

Список литературы

- [1] *Frank L.A.* Castability : From alumina to spinels // *Iron & steelmaker*. — 1999. — Vol. 26, no. 4. — Pp. 33–39.
- [2] *Chakraborty S., Hill W.* Improvement in Steel Cleanliness at Great Lakes No.2 Continuous Caster // *78th Steelmaking Conference Proceedings*. — 1995. — Vol. 78. — Pp. 401–413.
- [3] *Hao Li, Qiang Ren, Lifeng Zhang.* 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. — Pp. 167–178.
- [4] Influence of nonmetallic inclusion characteristics on the mechanical properties of rail steel / S.K. Dhua, Ray Amitava, S.K. Sen et al. // *Journal of Materials Engineering and Performance*. — 2000. — Vol. 9, no. 6. — Pp. 700–709.

- [5] *Choudhary S.K.* Influence of modified casting practice on steel cleanliness // *ISIJ international*. — 2011. — Vol. 51, no. 4. — Pp. 557–565.
- [6] *Clive Anderson, Yunitaka Murakami.* Extreme value models for the assessment of steels containing multiple types of inclusion // *Acta Materialia*. — 2006. — Vol. 54, no. 8. — Pp. 2277–2289.
- [7] *Григорович К.В., Красовский П.В., Трушников П.В.* Анализ неметаллических включений — основа контроля качества стали и сплавов // *Аналитика и контроль*. — 2002. — С. 133–142.
- [8] *Guldner W.G.* The determination of oxygen, hydrogen, nitrogen and carbon in metals: A review // *Talanta*. — 1961. — Vol. 8, no. 4. — Pp. 191–202.
- [9] *Крылов А.С.* Математическое моделирование и компьютерный анализ жидких металлических систем : дис. д-ра физ.-мат. наук — Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. — 2009.
- [10] *Григорович К.В.* Фракционный газовый анализ—новое направление в контроле качества материалов // *Аналитика и контроль*. — 2000. — № 3. — С. 244–251.
- [11] *Grigorovitch K.V., Krasovskii P.V., Krylov A.S.* Fractional Gas Analysis-Basic Principles and Application in Steel Quality // *Chemists conference*. — 1999. — P. 249–256.
- [12] Обработка и интерпретация результатов фракционного газового анализа / К.В. Григорович, П.В. Красовский, С.А. Исаков и др. // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. — 2002. — Т. 68. — С. 3–9.
- [13] Neural network method for determining the oxide composition of a metal by the non-isothermal gas evolution curve / D. D. Knorre, A.S. Krylov, K.V. Grigorovich, Y. K. Feldman // *Computational Mathematics and Modeling*. — 2025. — P. 1–14.
- [14] Scientific Machine Learning Through Physics-Informed Neural Networks: Where we are and What's Next / S. Cuomo, V.S. Di Cola, F. Giampaolo et al. // *Journal of Scientific Computing*. — 2022. — Vol. 92. — P. 88.

- [15] *Cardoso J.-F.* Blind signal separation: statistical principles // *Proceedings of the IEEE*. — 1998. — Vol. 86, no. 10. — Pp. 2009–2025.
- [16] *Eccomer J., Guiochon G.* Automatic peak detection in chromatography // *Chromatographia*. — 1982. — Vol. 15, no. 9. — Pp. 543–545.
- [17] *Park J., Lindberg C.R., Vernon F.L.* Multitaper spectral analysis of high-frequency seismograms // *Journal of Geophysical*. — 1987. — Vol. 92, no. B12. — Pp. 12675–12684.
- [18] *Laurent Erny Guillaume, Marzieh Moeenfard, Arminda Alves.* Iterative Multivariate Peaks Fitting—A Robust Approach for The Analysis of Non-Baseline Resolved Chromatographic Peaks // *Separations*. — 2021. — Vol. 8, no. 10. — P. 178.
- [19] *Zhijian Cai, Jianhong Wu.* 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*. — 2011. — Vol. 8200. — Pp. 125–133.
- [20] *Cauchy A.* Méthode g'én'érale pour la r'esolution des syst'emes d'equations simultan'ees. // *C. R. Acad. Sci. Paris*. — 1847. — Vol. 25. — Pp. 536—538.