

ZASTOSOWANIE SIECI NEURONOWYCH DO MODELOWANIA TEMPERATURY SOLIDUS PODEUTEKTYCZNYCH STOPÓW Al–Si–Cu

L.A. DOBRZAŃSKI¹, R. MANIARA², J. SOKOŁOWSKI³, W.T. KIERKUS⁴

^{1,2} Wydział Mechaniczny Technologiczny, Instytut Materiałów Inżynierskich i Biomedycznych, Politechnika Śląska, ul. Konarskiego 18a, 44-100 Gliwice, Polska,

^{3,4} Light Metals Casting Technology (LMCT) Group Room 212A, Essex Hall, 401 Sunset Avenue, Windsor, Ont. N9B 3P4, Canada

STRESZCZENIE

W pracy zaprezentowano metodę obliczania temperatury solidus dla podeutektycznych stopów Al–Si–Cu chłodzonych z różnymi szybkościami chłodzenia za pomocą sieci neuronowych. Dla sprawdzenia poprawności modelu wyznaczającego temperaturę solidus w funkcji składu chemicznego i prędkości chłodzenia wykonano eksperyment laboratoryjny. Wyniki przeprowadzonego eksperymentu laboratoryjnego potwierdzają poprawność opracowanego modelu.

Key words: aluminum alloys, solidus temperature, neural networks

1. WSTĘP

W ostatniej dekadzie wzrosło znacznie zainteresowanie oprogramowaniem CAE umożliwiającym modelowanie oraz kontrolę procesów odlewniczych. Efektywne wykorzystanie możliwości oferowanych przez pakiety CAE, (np.: Magma, Calphad, Pro-Cast, Thermo-Calc lub NovaFlow & Solid) w znacznym stopniu zmniejsza czas oraz koszty projektowanych konstrukcji, tym samym zwiększając wydajność i poprawę jakość produktów. Programy CAE umożliwiają: symulację wypełnienia wnek formy i krzepnięcia metalu, symulację wymiany ciepła w odlewie, prognozowanie wad

¹ dr h.c. prof. zw. dr hab. inż., leszek.dobrzanski@polsl.pl

² mgr. inż., rafal.maniara@polsl.pl

³ dr. inż., jerry@uwindsor.ca

⁴ dr. inż., w.kierkus@sympatico.ca

skurczowych, prognozowanie mikroporowatości oraz tworzenia się pęcherzy gazowych i prognozowanie struktury itp.

Dla wyznaczenia różnych parametrów fizycznych i metalurgicznych krzepnących odlewów aluminiowych potrzebna jest dokładna znajomość temperatury przemian fazowych zachodzących podczas krzepnięcia odlewów o określonym składzie chemicznym. Jak wynika z przeprowadzonych badań temperatura przemian fazowych zmienia się wraz ze zmianą składu chemicznego oraz zmianą warunków termodynamicznych krzepnących odlewów.

Na podstawie wyników badań prezentowanych w pracach [1, 7, 8, 12-15] stwierdzono, że wraz ze wzrostem szybkości stygnięcia następuje zmiana temperatury solidus badanego stopu.

2. METODYKA BADAŃ

Opracowanie modelu numerycznego umożliwiającego obliczenie temperatury solidus zależnie od składu chemicznego i prędkości chłodzenia wymagało zaprojektowania odpowiedniego zbioru danych doświadczalnych.

Zbiór danych reprezentatywnych obejmujących stężenie masowe pierwiastków, temperaturę likwidus, temperaturę solidus oraz czas krzepnięcia został opracowany na podstawie wyników badań własnych, wyników badań udostępnionych przez dr inż. W. Kierkus'a [6] oraz informacji literaturowych [6, 9, 13–15]. Zakres stężeń pierwiastków stopowych oraz zastosowanych w eksperymencie szybkości chłodzenia przedstawiono w tabelicy 1.

Tabela 1. Zakres stężeń masowych pierwiastków i szybkości chłodzenia (CR) analizowanych stopów Al–Si–Cu

Table 1. Range of mass concentration of elements and cooling rates (CR) in investigated Al–Si–Cu

| Zakres | Stężenie masowe pierwiastków, % | | | | | | | CR, K/s |
|----------------------------|---------------------------------|------|-------|-----|------|-----|------|---------|
| | Si | Fe | Cu | Mn | Mg | Zn | Ti | |
| min | 5 | 0,08 | 0,006 | 0 | 0,02 | 0 | 5 | 0,03 |
| max | 11,9 | 1,35 | 4,64 | 0,6 | 1,28 | 2,9 | 11,9 | 2,5 |
| %Sr+%Ni+%Sn+%Pb+%Na%Ca≤0,3 | | | | | | | | |

Szybkość chłodzenia obliczono na podstawie zależności:

$$CR = \frac{T_{LIQ} - T_{SOL}}{\Delta t} \quad (1)$$

gdzie:

T_{LIQ} temperatura likwidus,
 T_{SOL} temperatura solidus,
 Δt czas krystalizacji.

Utworzony zbiór danych przeznaczonych do budowy numerycznego modelu wyznaczającego temperaturę solidus w funkcji składu chemicznego i szybkości chłodzenia podzielono na dwa podzbiory: zbiór uczący i zbiór walidacyjny. Dane podzielono w proporcji 75% dla zbioru uczącego oraz 25% dla zbioru walidacyjnego. Podział danych na poszczególne zbiory wykonano w sposób losowy, obserwując dla każdego zbioru średnią arytmetyczną oraz odchylenie standardowe prognozowanej wartości

Dla sprawdzenia poprawności nauki sieci neuronowych (ANN) wykonano eksperyment metalurgiczny, którego wyniki posłużyły do utworzenia zbioru testowo-weryfikacyjnego. W laboratorium metalurgicznym University of Windsor wykonano sześć eksperymentalnych stopów o składzie chemicznym przedstawionym w tabeli 2. Stopy chłodzono z temperatury zalewania z szybkością chłodzenia od 0,10 do 2,2 K/s

Tabela 2. Skład chemiczny stopów przeznaczonych do testowania sieci neuronowych
Table 2. Chemical content of alloys used for artificial neural networks testing

| Nr. stopu | Stężenie masowe pierwiastków, % | | | | | | |
|-----------------------------|---------------------------------|------|------|------|------|------|------|
| | Si | Fe | Cu | Mn | Mg | Zn | Ti |
| 7-1 | 7,17 | 0,14 | 0,99 | 0,11 | 0,27 | 0,05 | 0,08 |
| 7-2 | 6,98 | 0,17 | 1,91 | 0,01 | 0,26 | 0,43 | 0,09 |
| 7-4 | 7,45 | 0,34 | 3,60 | 0,25 | 0,28 | 0,05 | 0,13 |
| 9-1 | 9,09 | 0,72 | 1,05 | 0,36 | 0,27 | 0,14 | 0,07 |
| 9-2 | 9,03 | 0,19 | 2,25 | 0,01 | 0,19 | 0,45 | 0,10 |
| 9-4 | 9,27 | 0,17 | 4,64 | 0,01 | 0,28 | 0,05 | 0,09 |
| %Sr+%Ni+%Sn+%Pb+%Na%Ca≤0,95 | | | | | | | |

Dane wykorzystane w procesie uczenia i testowania poddano normalizacji wykorzystując funkcję minimax dokonującą transformację dziedzin zmiennych do przedziału $\langle 0, 1 \rangle$.

Różnorodność zastosowanych w eksperymencie sieci neuronowych wymaga zastosowania wskaźników liczbowych, które pozwalają ocenić jakość procesu nauki. Jako podstawowe wskaźniki oceny wykorzystano: średni błąd prognozy sieci, iloraz odchyłeń standardowych dla błędów i danych, odchylenie standardowe błędu oraz współczynnik korelacji Pearson. Średni błąd prognozy sieci obliczono według zależności:

$$E = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (|X_{mi} - X_{pi}|) \quad (2)$$

gdzie:

E – średni błąd prognozy sieci,

N – liczba danych w zbiorze testowym,

X_{mi} – i -ta wartość zmierzona,

X_{pi} – i -ta wartość obliczona przez sieć neuronową.

Za wskaźnik jakości sieci neuronowej przyjęto iloraz odchyleń standardowych dla błędu i dla danych. Model numeryczny zależności temperatury solidus w funkcji składu chemicznego i szybkości chłodzenia obliczony sieciami neuronowymi można przyjąć za poprawny jeżeli prezentowane przez sieć wartości wyjściowe są obciążone mniejszym błędem niż proste oszacowanie wielkości nieznannej wartości wyjściowej.

Najprostszym sposobem obliczenia wartości wyjściowej pozostaje przyjęcie wartości średniej wartości wyjściowych dla zbioru uczącego i zbioru testowego. W tym przypadku błąd średni jest równy odchyleniu standardowemu dla wartości wyjściowej w zbiorze uczącym, natomiast iloraz odchyleń standardowych przyjmuje wartość jeden. Im mniejszy błąd predykcji sieci, tym iloraz odchyleń standardowych przyjmuje mniejsze wartości, osiągając zero dla "idealnej" prognozy [5, 7].

3. WYNIKI BADAŃ

Prezentowana w pracy metoda pozwala w łatwy i szybki sposób obliczyć temperaturę solidus dla dowolnego składu chemicznego i dowolnych warunków chłodzenia. W eksperymencie zastosowano następujące typy sieci neuronowych:

- Sieć typu MLP (perceptron wielowarstwowy), z algorytmami uczenia: propagacji wstecznej BP oraz gradientów sprzężonych (CG),
- Sieć typu RBL (sieć o radialnych funkcjach bazowych), z algorytmami uczenia: K-średnich (KM), K-najbliższych sąsiadów (KN) oraz pseudoinwersji, liniowej optymalizacji najmniejszych kwadratów (PI),
- Sieć typu GRNN (sieć realizująca uogólnioną regresję), z algorytmem uczącym próbkowania radialnego (SS).

Dla sieci typu MLP oraz GRNN uczenie wykonano dla jednej i dwóch warstw ukrytych, natomiast dla sieci z radialnymi funkcjami bazowymi trenowano dla jednej warstwy ukrytej. Struktury trenowanych sieci wraz z algorytmami uczenia przedstawiono w tabeli 3.

Tabela 3. Struktura i parametry uczenia zastosowanych w eksperymencie sieci neuronowych
Table 3. Structure and parameters of applied neural network

| Typ sieci | Struktura | Neurony I-wszej warstwy ukrytej | Neurony II-iej warstwy ukrytej | Algorytm uczenia |
|-----------|--------------|---------------------------------|--------------------------------|------------------|
| GRNN | 6:6-73-2-1:1 | 73 | 2 | SS |
| MLP | 6:6-6-47-1:1 | 6 | 47 | BP, CG |
| RBF | 6:6-70-1:1 | 70 | 0 | KM, PI |

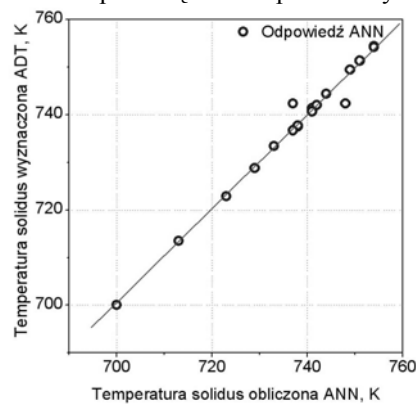
Sieci trenowano wykorzystując zbiór uczący składający się z 73 wektorów. Zbiór walidacyjny służący do modyfikacji wag zawierał 20 wektorów. Zmienną zależną był skład chemiczny ograniczony do pierwiastków: Si, Fe, Mn, Mg, Cu oraz szybkość chłodzenia, a zmienną niezależną była temperatura solidus.

W tabeli 4 zestawiono porównanie wskaźników opisujących jakość najlepszych trenowanych sieci należących do każdej z wyżej wymienionych grup.

Tabela 4. Jakość opracowanych w eksperymencie sieci neuronowych
Table 4. Quality of neural networks researched in experiment

| Wskaźnik | Typ sieci | | |
|----------------|-----------|--------|--------|
| | GRNN | MLP | RBF |
| Średnia | 464,21 | 464,21 | 464,21 |
| Odch. std. | 14,12 | 14,127 | 14,12 |
| Średni błąd | 18,61 | -1,435 | 0,002 |
| Odch. błędu | 12,69 | 8,322 | 2,117 |
| Śr. bł. bezwz. | 18,80 | 5,907 | 1,053 |
| Iloraz odch. | 0,898 | 0,589 | 0,149 |
| Korelacja | 0,440 | 0,838 | 0,988 |

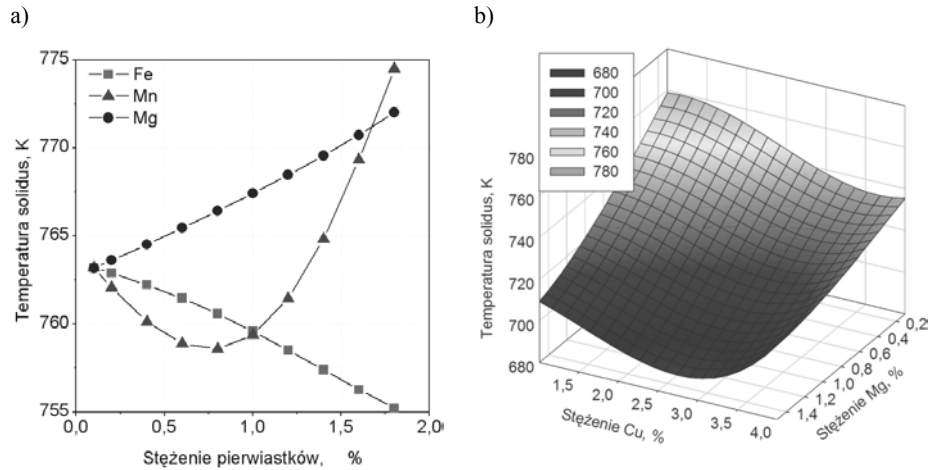
Na podstawie przeprowadzonych obliczeń najmniejszy błąd popełniany przy predykcji temperatury solidus zależnie od składu chemicznego i prędkości chłodzenia wystąpił dla sieci typu RBF wykorzystującej algorytm uczenia KM, a największy dla sieci typu GRNN. Na rys. 1 przedstawiono porównanie rzeczywistej temperatury solidus z temperaturą obliczoną dla najlepszej sieci (RBF), uzyskanej w wyniku eksperymentu. Sieć tę zastosowano do dalszych analiz wpływu składu chemicznego oraz szybkości chłodzenia na temperaturę solidus podeutektycznych stopów Al-Si-Cu.



Rys. 1. Porównanie rzeczywistej temperatury solidus z temperaturą obliczoną przy pomocy sieci neuronowej typu RBF.

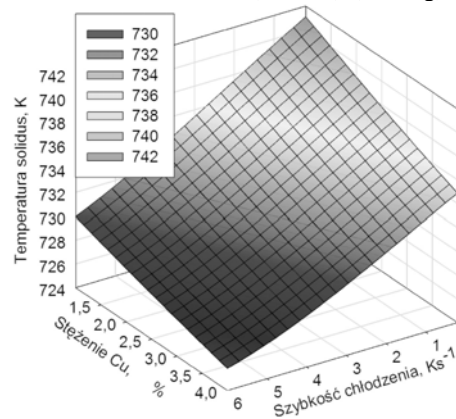
Fig. 1. Comparison of actual solidus temperature and temperature calculated by means of RBF network.

Przygotowany model sieci neuronowych wykorzystano do symulacji komputerowej wpływu składu chemicznego i prędkości chłodzenia na temperaturę solidus podeutektycznych stopów Al-Si-Cu. Na rys. 2 a, b przedstawiono wpływ stężenia masowego Cu, Mg, Mn, i Fe na temperaturę solidus modelowanego stopu chłodzonego 0,2 K/s.



Rys. 2. Wpływ a) Fe, Mn, Mg; b) Cu i Mg na temperaturę solidus odlewniczego stopu Al-Si-Cu o stężeniu pozostałych składników: 0,1%Mn, 0,5%Mg, 0,01%Ti, chłodzonego 0,2 K/s.

Fig. 2. Influence of a) Fe, Mn, Mg; b) Cu and Mg on the solidus temperature of the Al-Si-Cu alloy of the other element concentration: 0,1% Mn, 0,5% Mg, 0,01% Ti, cooled 0,2 K/s.



Rys. 3. Wpływ szybkości chłodzenia na temperaturę solidus siluminu o składzie chemicznym: 5%Si, 0,1%Fe, 0,1%Mn, 0,5%Mg, 0,1%Ti chłodzonego z różnymi prędkościami chłodzenia i różnym stężeniem Cu.

Fig. 3. The influence of cooling rate on the solidus temperature of the silumin of the following chemical content: 5% Si, 0,1% Fe, 0,1% Mn, 0,5% Mg, 0,1%Ti at various cooling rates and Cu concentrations.

Na podstawie przeprowadzonych symulacji stwierdzono, że największy wpływ na obniżenie temperatury solidus ma stężenie Cu, Mn do stężenia 0,7%, Mg oraz Fe. Pierwiastki te w dużym stopniu wpływają na własności mechaniczne i zmęczeniowe

odlewniczych stopów Al–Si–Cu po obróbce cieplnej, która oparta jest na wydzielaniu się faz Al_2Cu oraz Mg_2Si , a więc faz, które krystalizują jako ostatnie w procesie krystalizacji stopów grupy 3XX. Największy wpływ na wzrost temperatury solidus ma Mn dla stężeń większych od 0,7% oraz Mg.

Na rys. 3 przedstawiono wpływ szybkości chłodzenia na temperaturę solidus dla różnego stężenia Cu. Wzrost szybkości chłodzenia powoduje obniżenie temperatury solidus, efekt ten jest jedynie wzmacniany przez Cu, Fe i Mn do stężenia 0,7%. lub osłabiany przez Mg i Mn w stężeniu większym niż 0,7 %.

4. PODSUMOWANIE

Jak zaprezentowano w badaniach sieci neuronowe znakomicie nadają się do predykcji parametrów technologicznych na temperaturę solidus odlewniczych stopów aluminium. Błąd wynikający z obliczeń sieciami neuronowymi jest porównywalny z błędem uzyskanym w trakcie pomiarów temperatury solidus za pomocą urządzenia UMSA [9, 6].

Zastosowanie sieci neuronowych umożliwia częściowe zastąpienie kosztownych i czasochłonnych badań metalurgicznych. Opracowanie odpowiedniego modelu obliczeniowego umożliwia rozpatrywanie wpływu na temperaturę solidus nie tylko pojedynczego pierwiastka, ale również pary pierwiastków stopowych przy ustalonym na dowolnym, mieszczącym się w przyjętym zakresie stężeń, poziomie pozostałych składników. Otrzymany model sieci neuronowej można zastosować jako moduł systemów CAE wspomagających kontrolę procesów odlewniczych.

LITERATURA

- [1] J. Gilbert Kaufman, Elwin L. Rooy: Aluminium Alloy castings, AFS 2005.
- [2] Description of MAGMA, E-book – MagmaSoft, 2005.
- [3] K.Pettersson: NovaFlow@NovaStress new approach to the problems of filling the mould cavity and the metal solidification, Przegląd odlewnictwa, 4-2005, Kraków 2005.
- [4] J. Trzaska, L.A. Dobrzański: Application of neural networks for designing the chemical composition of steel with the assumed hardness after cooling from the austenitising temperature, 13th International Scientific Conference AMME 2005, Gliwice 2005.
- [5] J. Trzaska, L.A. Dobrzański: Modeling of transformations occurring during quenching in engineering steels, 3rd International Scientific Conference MMME 2005, Gliwice 2005.
- [6] W.T. Kierkus, M.B. Durdjevic, J.H. Sokolowski: Analysis of the Solidification of the 3XX Family of Aluminium Alloys, Data not published, 2002.
- [7] L.A. Dobrzański, J Trzaska, K. Pozimska: Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do wyznaczania temperatur Ac_1 Ac_3 stali konstrukcyjnych, Proceedings of the International Conference, Achievements in the Mechanical and Materials Engineering, AMME 2001.

- [8] L.A. Dobrzański, J. Trzaska, R. Maniara: Predykcja twardości stali konstrukcyjnych chłodzonych z temperatury austenitowania, Proceedings of the International Conference, Achievements in the Mechanical and Materials Engineering, AMME 2001.
- [9] R. MacKay, M. Durdjevic, J. Sokolowski: The effect of cooling rate on the fraction solid of the metallurgical reaction in the 319 alloy, AFS Transaction, 2000.
- [10] J.M. Boileau, J.W. Zindel and J.E. Allison: The effect of solidification time on the mechanical properties in a cast A356-T6 aluminum alloy, Society of Automotive Engineers, Inc., 1997.
- [11] S. Jura. Z. Jura: Teoria metody ATD w badaniach stopów Al, Krzepnięcie metali i stopów Nr. 28, PAN – Oddział Katowice, 1996.
- [12] J. Sakwa: Ocena zmian procesu krystalizacji stopów aluminium pod wpływem dodatków stopowych i domieszek, za pomocą analizy termicznej i derywacyjnej, Prace Instytutu Odlewnictwa Politechniki Śląskiej, Gliwice, 1989.
- [13] L. Backerud, E. Król, J. Tamminen: Solidification characteristics of aluminum alloys, Vol. 1, Universitetsforlaget, Oslo 1986.
- [14] L. Backerud, G. Chai J. Tamminen: Solidification characteristics of aluminum alloys, Vol. 2. AFS 1992.
- [15] L. Backerud, G. Chai: Solidification characteristics of aluminum alloys, Vol. 3, AFS 1992.

APPLICATION OF ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS FOR CALCULATION OF THE SOLIDUS TEMPERATURE OF HYPOEUTECTIC Al-Si-Cu ALLOYS

SUMMARY

This article presents the application of neural networks for prediction of the solidus temperature of various hypoeutectic Al – Si – Cu casting alloys cooled with different cooling rate. Knowledge of solidus temperature allows the prediction of a variety of metallurgical characteristics i.e. melt treatment, casting temperature. The paper presents computational algorithm calculation of solidus temperature and influence of alloying elements on solidus temperature. The accuracy of the calculated solidus temperature was compared with the values measured by the thermal analysis.

Recenzował: Prof. Jan Szajnar