**Расчет механических свойств сплавов системы Al-Mg-Zn-Cu-РЗМ с использованием алгоритмов машинного обучения**

***Вьюшин Е. О.***

*Студент, 4 курс бакалавриата, Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Институт Технологий, Москва, Россия*

*E-mail:* [*potatoinfo25@gmail.com*](mailto:potatoinfo25@gmail.com)

Алюминиевые сплавы благодаря высокой удельной прочности, коррозионной стойкости и технологичности нашли широкое применение во многих областях машиностроения в качестве конструкционного материала. Требования к механическим свойствам конструкционных материалов всегда были очень высоки. Расчетный метод определения необходимого состава сплава и режима его термической и термомеханической обработки для достижения необходимого уровня механических свойств значительно сокращает трудовременные и финансовые затраты. Однако определить зависимость механических свойств от влияющих факторов аналитически с достаточной точностью крайне трудно. Для решения подобных задач используются математические методы регрессионного анализа. Одними из наиболее мощных инструментов, позволяющих осуществлять регрессионный анализ, являются алгоритмы машинного обучения [1].

Целью данной работы – создание модели на основе алгоритмов машинного обучения для расчета значений предела текучести, предела прочности и относительного удлинения сплавов системы Al-Mg-Zn-Cu-РЗМ (где РЗМ – Y, Er, Gd, Yb) в зависимости от химического состава и режима термической и термомеханической обработки с абсолютной средней ошибкой, не превышающей 15 МПа.

В качестве моделей были использованы алгоритмы машинного обучения: бэггинг (RandomForest, RF) и градиентный бустинг (Gradient Boosting Decision Tree, GBDT), а также искусственная нейронная сеть (ИНС) типа многослойный перцептрон (Multi-layered Perceptron, MLP) [2, 3]. Для обучения использовалась база данных результатов 267 механических испытаний сплавов разного состава и режимов термической и термомеханической обработки. Предварительно был проведен анализ данных для выявления выбросов и исключения неинформативных признаков.

Для оценки ошибки расчета механических свойств после обучения тестовой выборке использовались средняя абсолютная ошибка (Mean Absolute Error, MAE) и коэффициент детерминации R2. Значения этих характеристик приведены в таблице 1.

Таблица 1. Значения MAE и R2 моделей в определении механических свойств на тестовой выборке

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  | | |  | | |  | | |
| MLP | GBDT | RF | MLP | GBDT | RF | MLP | GBDT | RF |
|  | 15,81 МПа | 11,74 МПа | 14,49 МПа | 15,25 МПа | 13,11 МПа | 15,75 МПа | 1,5 % | 1,3 % | 1,3 % |
|  | 0,85 | 0,92 | 0,89 | 0,91 | 0,93 | 0,90 | 0,70 | 0,81 | 0,81 |

Обученная модель градиентного бустинга лучше описывает зависимость прочностных свойств от входных параметров, о чем говорит наибольшее значение R2. Кроме того, модели GBDT и RF также показали наименьшую ошибку в определении относительного удлинения, что указывает на их способность обучаться на менее сбалансированных данных.

**Литература**

1. Xiong, J., Shi, S., & Zhang, T. (2019). A machine-learning approach to predicting and understanding the properties of amorphous metallic alloys. Materials & Design, 187, 108378.

2. Rokach, L., & Maimon, O. (2006). Decision Trees. In Springer eBooks (pp. 165–192).

3. Petr Opela, Ivo Schindler, Petr Kawulok, Rostislav Kawulok, Stanislav Rusz, Michael Sauer, «Shallow and deep learning of an artificial neural network model describing a hot flow stress Evolution: A comparative study», Materials & Design, 2022.