

М. С. Присташ¹, С. Ф. Присташ², кандидати технічних наук; **О. М. Сизоненко**, д-р техн. наук; **А. С. Торпаков, Є. В. Липян¹; Н. О. Олійник³**, кандидати технічних наук

¹Інститут імпульсних процесів і технологій НАН України, просп. Богоявленський, 43а, 54018, м. Миколаїв, Україна, e-mail: sizonenko43@rambler.ru

²Національний університет кораблебудування ім. адм. Макарова, просп. Героїв України, 9, 54025, м. Миколаїв, Україна, e-mail: belayasvf@gmail.com

³Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, вул. Автозаводська, 2, 04074, м. Київ, Україна, e-mail: oleyunik_nonna@ukr.net

ПРОГНОЗУВАННЯ ПРОЦЕСІВ ВИСОКОВОЛЬТНОГО ЕЛЕКТРОРОЗРЯДНОГО СИНТЕЗУ КАРБІДУ ТИТАНУ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Шляхом математичного моделювання з використанням методів машинного навчання отримані поверхні розподілу температури плазми в каналі розряду, значень тиску в каналі розряду, тиску на стінці камери, кількості карбиду титану, що утворився під час обробки в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів, при використанні іскрового розряду та концентрації порошку титану у гасі 0,07 кг/дм³, частоті слідування імпульсів 0,3 Гц та енергії одиничного впливу 1кДж. Встановлена можливість використання методів машинного навчання для прогнозування процесів та результатів високовольтної електророзрядної обробки порошку титану у гасі із використанням іскрового розряду та необхідність розглянути інші, більш точні алгоритми машинного навчання.

Ключові слова: карбід титану, високовольтний електричний розряд, плазма, гас, машинне навчання, логістична регресія, метод Random forest.

Вступ

Традиційні методи аналізу складу та властивостей матеріалів є трудомісткими та дорогими. Сучасним лабораторіям у середньому потрібно до 10 років на розробку нових матеріалів і до 20 років для їх масового виробництва. Однак, використання технологій моделювання при розробці нових матеріалів дозволяє зменшити час розробки та впровадження нових матеріалів майже у два рази за рахунок високої швидкості отримання результатів, повторюваності, безпечності, швидкому виявленню помилок та низькій вартості.

Моделювання, засноване на великих базах даних, засновується на припущенні, що, оскільки дані надходять як з добре вивчених, так і не з дуже добре вивчених розділів фізики, що відносяться до розглянутого питання, розвиток моделі, заснованої на великих базах даних, може врахувати всю фізику явища разом [1].

Високовольтна електророзрядна обробка (ВЕР) порошкових сумішей – це один з сучасних методів подрібнення та зміни фазового складу порошків металів та надтвердих матеріалів, який відзначається не лише ефективністю, а і низькою собівартістю процесу у порівнянні з класичними методами подрібнення. Зокрема, ВЕР використовується для створення карбідтитанових твердих сплавів [2] та подрібнення порошків карбиду бору [3] та синтетичного алмазу [4].

Але фізичний механізм процесів диспергування при використанні ВЕР у рідині вивчено ще недостатньо. У роботах [5, 6] висловлено припущення, що основну роль у руйнуванні частинок

матеріалу, що знаходяться в зоні розряду, грає ударна хвиля, що генерується каналом іскрового розряду. Крім цього, в процесі диспергування в різній мірі беруть участь об'ємна мікрокавітація, руйнування частинок при ударі об стінки розрядної камери і взаємне стирання частинок при перемішуванні у всьому об'ємі камери. Вибір порошку титану обумовлений актуальністю та широкими можливостями його використання в якості наповнювача, модифікатора, або компонента металоматричних композитів, в тому числі і карбідотитанових твердих сплавів.

Враховуючи це, використання методу моделювання на великих базах даних може дати більш точні результати прогнозування процесів та результатів ВЕР обробки.

Тому метою роботи є дослідження можливості використання методів машинного навчання для прогнозування результатів високовольтної електророзрядної обробки порошку титану у вуглеводневій рідині.

Об'єкти і методи дослідження

В загальному вигляді процес машинного навчання складається з вхідних даних, алгоритму та результатів, які були отримані. Додатково до процесу можуть бути додані дані попереднього «навчання» моделі, що дозволяє оцінити точність прогнозу. Така модель має назву «контрольована».

В якості алгоритмів модулювання було обрано логістичну регресію та метод *Random forest*. В якості мови реалізації – язык програмування *Python* та додаток *Colaboratory*, або скорочено *Colab* – продукт від *Google Research*. *Colab* дозволяє писати та виконувати довільний код *Python* через браузер і особливо добре підходить для реалізації машинного навчання та аналізу даних.

Логістична регресія – це алгоритм класифікації, що використовується для віднесення даних до дискретного набору класів. На відміну від лінійної регресії, що виводить безперервні числові значення, логістична перетворює вихідні дані за допомогою сигмоїду. Це один з найпростіших алгоритмів, який можна використовувати для вирішення задач класифікації [7].

Random forest – метод машинного навчання для класифікації, регресії та інших завдань, який працює за допомогою побудови численних дерев прийняття рішень під час тренування моделі й продукує усереднений прогноз (регресію) побудованих дерев [8, 9].

В якості даних для моделювання були використані результати обробки вихідного порошку титану в гасі із використанням одновістрійної електродної системи, яка дозволяє реалізувати у середовищі гас-порошок іскровий розряд (IP), отримані в період в 2013 до 2021 років. Дані включали у себе інформацію про кількість імпульсів обробки, розрядний проміжок, тиск у канали розряду та тиск на стінках камери, яка детально розглянута у роботах [2–4, 10], та кількість карбиду титану, розраховану за методикою *RIR* [11].

Однією з поставлених задач моделювання було визначити базові елементарні характеристики ВЕР обробки, які можна безпосередньо контролювати, і які б чинили вплив на результати самої обробки. Для цього було проведено попередню обробку даних, що дозволило виключити сталі величини для всіх обраних обробок – концентрацію порошку титану у вуглеводневій рідині (0,07 г/дм³), енергію одиничного розряду (1 кДж) та частоту слідування розрядів (0,3 Гц). Це дозволило визначити основні змінні, які стануть вхідними даними, а саме розрядний проміжок та кількість імпульсів впливу, що впливають на формування каналу розряду та характеристики середовища, а тому і на вихідні дані: температуру плазми, тиск у каналі розряду, тиск на стінці камери та кількість карбиду титану, що утворився після ВЕР обробки.

Величина розрядного проміжку безпосередньо впливає на форму, довжину та об'єм плазмового каналу розряду і на режим ВЕР, який буде реалізовано після його пробою [2–4, 10]. По мірі збільшення кількості імпульсів відбувається піроліз гасу з утворенням твердофазного нановуглецю та диспергуванням частинок оброблюваного порошку, що

спричиняє поступову зміну властивостей робочого середовища і, як наслідок, зміну гідродинамічних характеристик розряду та режиму ВЕР. До того ж, ВЕР супроводжується поступовою ерозією електроду та може супроводжуватись змінами геометрії електродної системи, що призводить до зміни ефективного значення міжелектродного проміжку під час обробки та також впливає на характеристики розряду [2–4, 10].

Для прогнозування вихідних даних була використана контрольована модель машинного навчання. Для цього дані були поділені у співвідношенні 80 / 20 відсотків для визначення точності прогнозу, для чого була використана метрика *Accuracy* [12].

Результати і обговорення

Завдяки використанню моделі логістичної регресії були отримані наступні залежності температури плазмового каналу від величини міжелектродного проміжку та кількості імпульсів обробки (рис. 1, а). Встановлено, що розподіл є доволі нерівномірним, а отримані значення складають близько 28000 К для кількості імпульсів від 200 до 1000 майже у всіх значеннях міжелектродного проміжку, та до 35000 К при збільшенні кількості імпульсів з 1000 до 1400. Це може бути пов'язано із зменшенням ефективного значення міжелектродного проміжку в результаті диспергування частинок та зростання кількості седиментованих у робочій рідині у зоні міжелектродного проміжку частинок порошку. Окремо слід відзначити, що температури плазми у 35000 К характерні для проміжку з 2 мм до 14 мм, та спостерігаються також при лінійному зростанні міжелектродного проміжку та кількості імпульсів впливу. Також на розподілі спостерігаються зони зменшення температури плазми до 28000 К, що може бути пов'язано із змінами, які відбуваються у середовищі гас-порошок титану.

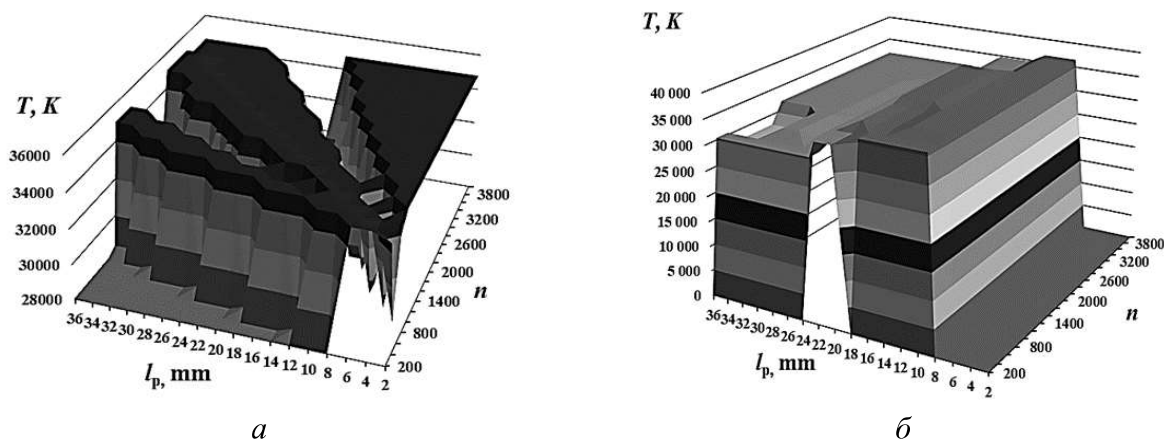


Рис. 1. Розподіл значень температури плазми в каналі розряду в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів при використанні l_p , отриманий згідно з моделями логістичної регресії (а) та *Random forest* (б)

Розподіли, отримані за допомогою *Random forest*, відрізняються від отриманих за допомогою логістичної регресії (рис. 1, б). Так, у міжелектродному проміжку від 2 мм до 8 мм згідно з результатами моделювання плазмового каналу не утворюється взагалі. Фактично, у такому режимі пробій відбувається, але реалізовується режим короткого замкнення, який суттєво відрізняється від типових для ВЕР-обробки порошкових сумішей режимів ВЕР. При більших величинах проміжку температура плазми майже у всіх можливих випадках складає близько 30000 К, а найвищі значення, до 35000 К, вона має на проміжку від 8 мм до 18 мм на усьому проміжку кількості імпульсів обробки. Це пов'язано із тим, що запасена енергія одиничного розряду у таких режимах виділяється у меншому об'ємі плазмового каналу.

При утворенні в міжелектродному проміжку плазми формується хвиля стиснення-розтягування, яка рухається від зони каналу розряду до стінок камери. На рис. 2, а зображено розподіл значень тиску в каналі розряду в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів при використанні іскрового розряду.

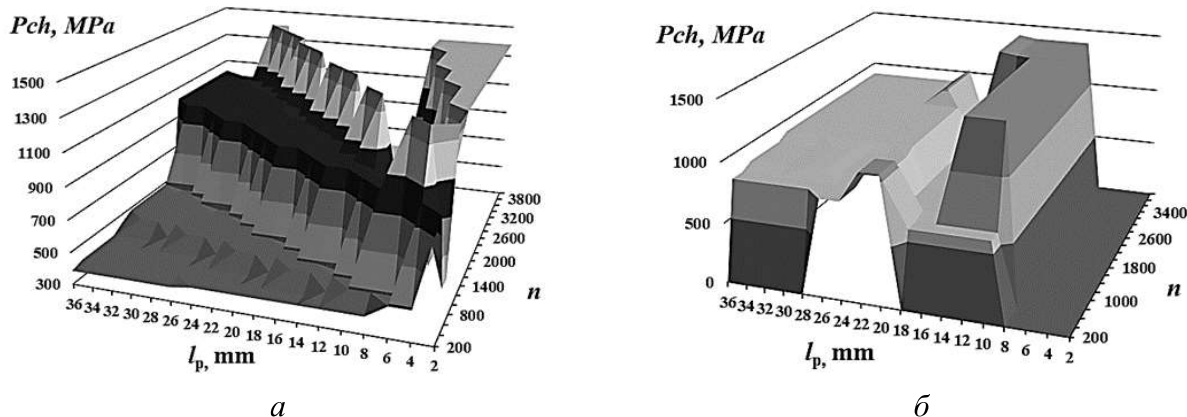


Рис. 2. Розподіл значень тиску в каналі розряду в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів при використанні IP, отриманий згідно з моделями логістичної регресії (а) та Random forest (б)

Видно, що значення амплітуди тиску у каналі від 800 МПа до 1300 МПа характерні для зони лінійної залежності збільшення як міжелектродного проміжку, так і кількості розрядів впливу.

Також слід зазначити, що найбільшим значенням тиску в каналі (до 1800 МПа) розряду характеризується область із міжелектродним проміжком від 2 мм до 6 мм, починаючи з 1000 імпульсів обробки.

Відповідно до розподілу температури плазми при Random forest, тиск у каналі розряду (рис. 2, б) дорівнює нулю у міжелектродному проміжку від 2 мм до 8 мм, у проміжку від 8 до 18 мм має максимальні значення до 1,5 ГПа майже при усіх значеннях кількості імпульсів обробки, а у проміжку від 18 мм до 36 мм тиск дорівнює 1 ГПа. Такі результати пов'язані із тим, що у проміжку від 2 до 8 мм при обробці титану у гасі реалізується режим короткого замкнення, який не є ефективним ані з точки зору диспергування, ані з точки зору синтезу карбиду титану, тому такі обробки практично не виконувалися, а їх результати у значній мірі відсутні у вихідній базі даних.

Стабільно високими значеннями тиску на стінці камери (до 130 МПа), згідно з моделями логістичної регресії, характеризуються зони, що належать до лінійної залежності збільшення міжелектродного проміжку та кількості розрядів впливу (див. рис. 3, а). Найбільші значення тиску на стінці камері (150 МПа) мають зони, що відповідають найвищим значенням тиску у каналі розряду – це області із міжелектродним проміжком від 2 мм до 6 мм, починаючи з 1000 імпульсів обробки.

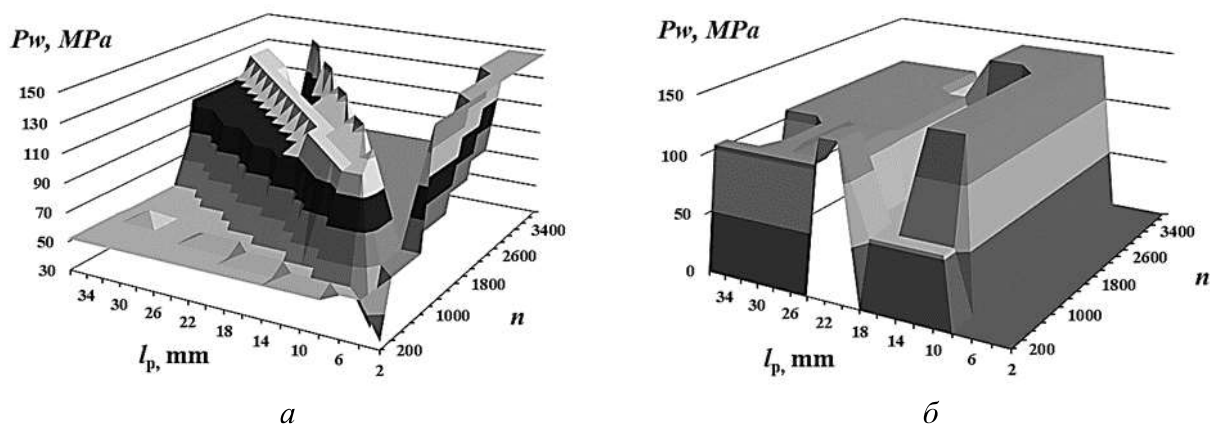


Рис. 3. Розподіл тиску на стінці камери в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів при використанні IP , отриманий згідно з моделями логістичної регресії (а) та *Random forest* (б)

Величина тиску на стінках камери згідно з *Random forest* (рис. 3, б) також співвідноситься з величинами температури плазми та тиском в каналі розряду (рис. 1, б та 2, б). Так, у міжелектродному проміжку від 2 мм до 8 мм значення тиску дорівнює 0, на проміжку від 8 мм до 18 мм на усьому проміжку кількості імпульсів обробки має максимальні значення у 140 МПа, а у проміжку від 18 мм до 36 мм – становить близько 100 МПа незалежно від кількості імпульсів обробки.

У результаті гідродинамічного впливу та впливу плазми каналу розряду на порошок титану у гасі під час ВЕР-обробки відбувається його подрібнення, сфероїдація часток та хімічні перетворення з утворенням карбиду титану [10, 13].

На рис. 4 наведені дані щодо кількості карбиду титану, який утворився під час ВЕР-обробки. Цей процес залежить від багатьох факторів: подрібнення, присутності плазми, наявності вільного вуглецю – але, згідно з моделлю логістичної регресії, кількість карбиду під час обробки поступово збільшується з 0 до 40 % зі збільшенням кількості імпульсів обробки від 200 до 4000. Однак, для міжелектродного проміжку від 20 мм до 36 мм цей процес активно починається від 1000 імпульсів обробки, а при 4000 імпульсів кількість утвореного карбиду не перевищує 30 %.

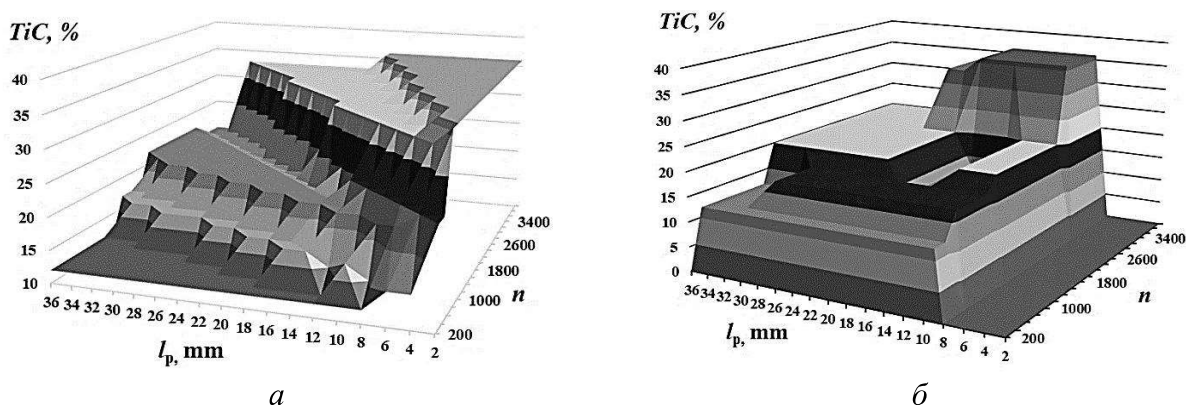


Рис. 4. Розподіл кількості карбиду титану що утворився під час обробки в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів при використанні IP , отриманий згідно з моделями логістичної регресії (а) та *Random forest* (б)

На рис. 4, б зображена прогнозована кількість карбіду титану, що утвориться після ВЕР-обробки згідно *Random forest*. При міжелектродному проміжку від 2 мм до 8 мм карбідизації не відбувається (оскільки у такому проміжку може реалізуватися лише режим короткого замкнення), у проміжку від 8 до 36 мм при кількості імпульсів обробки від 200 до 2000 утворюється близько 10 % карбіду титану, а від 2000 до 4000 імпульсів – близько 20 %. Однак, при значенні міжелектродного проміжку від 10 мм до 20 мм та кількості імпульсів обробки від 2500 до 4000 можна досягти карбідизації титану на рівні 35 %.

Варто зазначити, що результати моделювання не враховують можливої зміни міжелектродного проміжку під час обробки внаслідок взаємодії шару порошку із гідропотоками. І хоча отримані дані знаходяться у межах моделі, з них не можна робити практичних висновків щодо оптимальної для карбідизації величини міжелектродного проміжку у діапазоні вище 20 мм.

Висновки

Показана можливість використання методів машинного навчання для прогнозування значень температури плазми в каналі розряду, тиску в каналі розряду, тиску на стінках камери та кількості утвореного карбіду титану в залежності від міжелектродного проміжку та кількості імпульсів в результаті високовольтної електророзрядної обробки порошку титану у гасі із реалізацією IP.

Встановлено, що згідно з прогнозами логістичної регресії найвищі значення температури плазми та тиску при обробці можна отримати, пропорційно збільшуючи значення кількості імпульсів обробки відповідно до значення міжелектродного проміжку, а карбідизація титану відбувається краще на проміжку до 18 мм зі збільшенням кількості імпульсів обробки.

Результати прогнозування за допомогою *Random forest* мають більшу точність відносно експериментальних даних та свідчать про те, що при використанні міжелектродного проміжку від 10 мм до 18 мм значення температури плазми досягають 40000 К, тиск у каналі розряду – 1,5 ГПа, а тиск на стінках камери – 140 МПа. При значенні міжелектродного проміжку від 10 мм до 20 мм та кількості імпульсів обробки від 2500 до 4000 можна досягти карбідизації титану на рівні 35 %. Також методика *Random forest* більш коректно враховує той факт, що обробка із проміжком від 2 до 8 мм є реалізацією неефективного режиму короткого замкнення, який практично не досліджувався.

M. S. Prystash¹, S. F. Prystash², O. M. Syzonenko¹, A. S. Torpakov¹, Ye. V. Lypian¹, N. O. Oliinyk³

¹*Institute of Pulse Processes and Technologies of the National Academy of Sciences of Ukraine*

²*Admiral Makarov National University of Shipbuilding*

³*V. M. Bakul Institute for Superhard Materials of the National Academy of Sciences of Ukraine*

FORECASTING PROCESSES OF HIGH VOLTAGE ELECTRIC DISCHARGE SYNTHESIS OF TITANIUM CARBIDE USING MACHINE LEARNING METHODS

The surfaces of the plasma temperature distribution in the discharge channel, the values of the pressure in the discharge channel, the pressure on the chamber wall, the amount of titanium carbide formed during processing depending on the interelectrode gap and the number of pulses are obtained by mathematical modeling using machine learning methods for spark discharge at the concentration of titanium powder in kerosene of 0.07 kg / dm³, the pulse repetition frequency of 0.3 Hz and the energy of single impact of 1 kJ. The possibility of using machine learning methods to predict the processes and results of high-voltage electric

discharge treatment of titanium powder in kerosene using spark discharge and the need to consider other, more accurate machine learning algorithms, are shown.

Key words: *titanium carbide, high voltage electric discharge, plasma, kerosene, machine learning, logistic regression, Random forest method.*

Література

1. Bouchiba K., Kayvantash K., Hanna K. Whitepaper: The Emergence of Artificial Intelligence in CAE Simulation for manufacturers. Брошюра компанії MSC Software [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://www.mscsoftware.com/artificial-intelligence-manufacturing-report> (дата звернення: 10.04.2022).
2. Sizonenko O. N., Baglyuk G. A., Raichenko A. I., et al. Effect of high-voltage discharge on the particle size of hard alloy powders // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. – 2011. – Vol. 49, N 11. – P. 630–636.
3. Syzonenko O.M., Loboda P.I., Zaichenko A.D., et al. The influence of high-voltage electrical discharge on dispersion and structure of B₄C powder // J. Superhard Materials. – 2017. – Vol. 39, N 4. – P. 243–250.
4. Sizonenko O. N., Oleinik N. A., Petasyuk G. A., et al. Effect of high-voltage electrical discharge treatment of diamond powders on their mechanical characteristics // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. – 2013. – Vol. 57, N 7. – P. 365–369.
5. Гаврилов Г. Н., Горovenko Г. Г., Малюшевский П. П., Рябинин А. Г. Разрядноимпульсная технология обработки минеральных сред. – К.: Наукова думка, 1979. – 163 с.
6. Курец В. И., Усов А. Ф., Цукерман В. А. Электроимпульсная дезинтеграция материалов. – Апатиты: Изд-во Кольского научного центра РАН, 2002. – 324 с.
7. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning, 2nd edition. – Springer, 2009. – 533 p.
8. Breiman L. Random Forests // Machine Learning. – 2001. – Vol. 45. – P. 5–32.
9. Raschka S., Mirjalili V. Python machine learning: Machine learning and deep learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow 2. – Packt Publishing Ltd, 2019. – 622 p.
10. Sizonenko O. M., Prystash M. S., Taftai E. I., et al. Modeling of Electric-Discharge Processes in the Course of Treatment of Titanium in Hydrocarbon Liquids // Materials Science. – 2021. – Vol. 57. – P. 209–214.
11. Chipera S. J., Bish D. L. Multireflection RIR and intensity normalizations for quantitative analyses: Applications to feldspars and zeolites // Powder Diffraction. – 1995. – Vol. 10. – P. 47–55.
12. Powers D.M.W. Evaluation: from precision, recall and f-measure to roc, informedness, markedness & correlation // Journal of Machine Learning Technologies. – 2011. – Vol. 2, N 1. – P. 37–63.
13. Sizonenko O. N., Baglyuk G. A., Taftai E. I., et al. Dispersion and carburization of titanium powders by electric discharge // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. – 2013. – Vol. 52, N 5. – P. 247–253.

Надійшла 28.06.22

References

1. Bouchiba, K., Kayvantash, K., & Hanna, K. Whitepaper: The Emergence of Artificial Intelligence in CAE Simulation for manufacturers. MSC Software bulletin. (n.d.). www.mscsoftware.com. Retrieved from // www.mscsoftware.com/artificial-intelligence-300

- manufacturing-report
2. Sizonenko, O. N., Baglyuk, G. A., Raichenko, A. I., et al. (2011). Effect of high-voltage discharge on the particle size of hard alloy powders. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, 49, 11, 630–636.
 3. Sizonenko, O.M., Loboda, P.I., Zaichenko, A.D. et al. (2017). The influence of high-voltage electrical discharge on dispersion and structure of B₄C powder. *Journal of Superhard Materials*, 39, 4, 243–250.
 4. Sizonenko, O. N., Oleinik, N. A., Petasyuk, G. A., et al. (2013). Effect of high-voltage electrical discharge treatment of diamond powders on their mechanical characteristics. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, 57, 7, 365–369.
 5. Gavrilov, G. N., Gorovenko, G. G., Malyushvskii, & P. P., Ryabinin, A. G. (1979). *Razriadnoimpulsnaia tekhnolohiia obrabotki mineralnykh sred [Pulsed discharge technology of mineral mediums treatment]*. – Kiev: Naukova Dumka [in Russian].
 6. Kurets, V. I., Usov, A. F., & Tsukerman, V. A. (2002). *Elektroimpulsnaia dezintehatsia materialov [Electric pulse disintegration of materials]*. – Apatity: RAS Kola scientific centre publishing house [in Russian].
 7. Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning, 2nd edition*. – Springer.
 8. Breiman, L. (2001). Random Forests. *Machine Learning*, 45, 5–32.
 9. Raschka, S., & Mirjalili, V. (2019). *Python machine learning: Machine learning and deep learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow 2*. – Packt Publishing Ltd.
 10. Sizonenko, O. M., Prystash, M. S., Taftai, E. I., et al. (2021). Modeling of Electric-Discharge Processes in the Course of Treatment of Titanium in Hydrocarbon Liquids. *Materials Science*, 57, 209–214.
 11. Chipera, S. J. & Bish, D. L. (1995). Multireflection RIR and intensity normalizations for quantitative analyses: Applications to feldspars and zeolites. *Powder Diffraction*, 10, 47–55.
 12. Powers, D.M.W. (2011). Evaluation: from precision, recall and f-measure to roc, informedness, markedness & correlation. *Journal of Machine Learning Technologies*, 2, 1, 37–63.
 13. Sizonenko, O. N., Baglyuk, G. A., Taftai, E. I., et al. (2013). Dispersion and carburization of titanium powders by electric discharge. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, 52, 5, 247–253.