

Određivanje parametara pougljičavanja čelika primjenom neuronske mreže

Božidar Matijević¹, Dragutin Lisjak¹

¹Sveučilište u Zagrebu Fakultet strojarstva i brodogradnje, Ivana Lučića 5, 10000 Zagreb, bozidar.matijevic@fsb.hr

Sažetak: U ovom radu prikazana je primjena neuronskih mreža za izračun zakonitosti složenih procesa, među koje se ubrajaju i procesi difuzije ugljika pri pougljičavanju čelika. Prikazani su empirijski i matematički modeli procesa pougljičavanja Carbomaag, koji se primjenjuju u praksi za određivanje tehnoloških parametara pougljičavanja kojima se postiže zahtijevani profil koncentracije ugljika u pougljičenom sloju. U radu se posebna pozornost posvećuje usporedbi matematičkog modela (MM) i modela neuronske mreže (NNM) te empirijskog modela (EM) s obzirom na vrijeme potrebno za postizanje male i velike dubine cementiranja. Rezultati empirijskog modela pougljičavanja korišteni su kao skup podataka za treniranje neuronske mreže te su uspoređeni s rezultatima računalne simulacije matematičkog modela. Usporedba rezultata dobivenih pri malim i velikim dubinama pougljičavanja pokazuje da model neuronske mreže znatno bolje aproksimira empirijski model nego matematički model. Pretpostavlja se da bi provedba većeg broja eksperimenata i ponovno treniranje neuronske mreže s novim skupovima eksperimentalnih podataka dovelo do još kvalitetnijih rješenja. Time bi se izbjegli nedostaci teorijskih modela, odnosno matematičkih modela.

Ključne riječi: Carbomaag, pougljičavanje, cementiranje, neuronske mreže

1. Uvod

Osnovni zahtjevi za postupak cementiranja čelika su sljedeći:

- a) površinska tvrdoća: 60 - 64 HRC,
- b) efektivna dubina pougljičenog sloja: 0,1 - 3 mm.

Osim toga, često se postavljaju i zahtjevi vezani uz mikrostrukturu (npr. veličinu zrna) ili mehanička svojstva (npr. žilavost jezgre). Kako bi se zadovoljili osnovni zahtjevi tijekom pougljičavanja mora se postići određeni profil koncentracije ugljika u površinskom sloju. Koncentracija ugljika u površinskom sloju treba biti u rasponu od

0,6 - 0,8 %C, dok na traženoj efektivnoj dubini pougljičavanja (E_{dp}) treba iznositi približno 0,35 %C. Time se nakon kaljenja omogućuje postizanje tvrdoće od 550 HV1. Na profil koncentracije ugljika u pougljičenom sloju utječu sljedeći čimbenici: vrsta plinske atmosfere, potencijal ugljika plinske atmosfere, temperatura pougljičavanja, početna koncentracija ugljika u čeliku, koncentracija legirnih elemenata te vrijeme pougljičavanja.

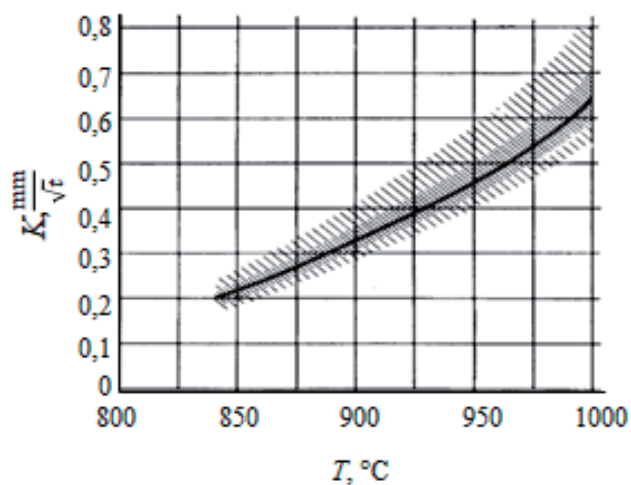
Za određivanje tehnoloških parametara pougljičavanja, prvenstveno potencijala ugljika (C_p) i potrebnog vremena pougljičavanja (t) kojim se postiže zahtijevani profil koncentracije ugljika u pougljičenom sloju, koriste se različiti modeli. Ti se modeli svrstavaju u dvije glavne skupine, empirijski modeli (EM) i matematički modeli (MM). Empirijski modeli nisu univerzalni jer su ograničeni na usko područje primjene, što predstavlja njihov glavni nedostatak. Matematički modeli s druge strane, daju rješenja koja su univerzalnija po svojoj prirodi jer se temelje na temeljnim fizikalno-kemijskim zakonima procesa pougljičavanja. Njihov glavni nedostatak jest to što nije moguće predvidjeti sve međudjelovanja čimbenika uključenih u proces pougljičavanja.

Nedostaci empirijskih i matematičkih modela bili su glavni razlog za istraživanje i primjenu neuronskih mreža u procesu pougljičavanja čelika. Empirijski i matematički modeli korišteni za učenje i testiranje neuronske mreže opisani su u sljedećim poglavljima.

2. Empirijski model (EM)

Na temelju prethodno provedenih eksperimenata utvrđen je odnos između vremena pougljičavanja i efektivne dubine sloja u čeliku s traženim udjelom ugljika u površinskim slojevima. Utvrđeni odnos je eksponencijalan i vrijedi za određene parametre procesa kao što su: plinska atmosfera, C-potencijal plinske atmosfere, temperatura pougljičavanja i kemijski sastav čelika. Na taj način svaki empirijski model ograničen je na usko područje primjene. To znači da se odnosi u procesu pougljičavanja moraju određivati u različitim plinskim atmosferama, pri konstantnim C potencijalima i temperaturama pougljičavanja za svaku vrstu čelika (ugljične i brojne legirane čelike za cementiranje). Dubina pougljičenog sloja za postupak "Carbomaag" [1] približno je proporcionalna kvadratnom korijenu vremena pougljičavanja (Slika 1):

$$K = \frac{E_{dp}}{\sqrt{t}}, \frac{mm}{\sqrt{t}} \quad (1)$$



Slika 1: Ovisnost faktora K o temperaturi [1]

odnosno vrijeme pougljičavanja:

$$t = \left(\frac{E_{dp}}{K} \right)^2, h \quad (2)$$

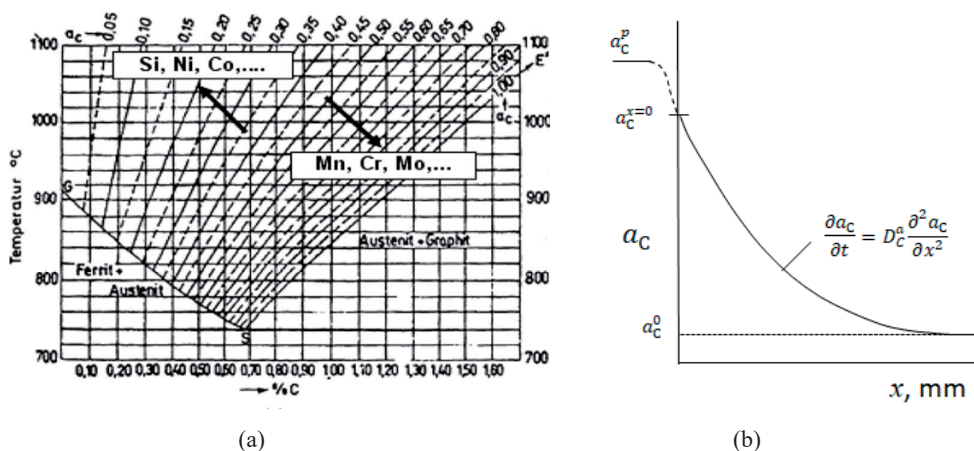
gdje su: K - faktor proporcionalnosti u $\frac{\text{mm}}{\sqrt{t}}$, E_{dp} - efektivna dubina pougljičavanja u mm, a t - vrijeme pougljičavanja u satima h. Primjeri vrijednosti koeficijenta K dobivenih empirijskim izračunom prema spomenutim zakonitostima u praksi za različite vrste čelika navedeni su u Tablici 1.

Tablica 1: Prikaz dobivenih koeficijenta proporcionalnosti i vremena t [>1] za različite kvalitete čelika

DIN 17006	%C	%Si	%Mn	%Cr	%Ni	E_{dp} , mm	T , $^{\circ}\text{C}$	C_p , %	K , $\frac{\text{mm}}{\sqrt{t}}$	t , min
C10	0,10	0,25	0,45	0,00	0,00	0,1 - 0,4	880	1,20	0,375	4 - 68
						0,5 - 0,7	900			
C15	0,15	0,25	0,45	0,00	0,00	0,8 - 1,0	920	1,15	0,425	83 - 163
14NiCr14	0,14	0,40	0,55	1,50	3,25	1,1 - 3,0	940	1,15	0,475	170 - 266
15NiCr6	0,15	0,28	0,50	1,55	1,55	0,5 - 0,7	900	0,90	0,450	74 - 145
18CrNi8	0,18	0,28	0,50	1,95	1,95	0,8 - 1,0	920	0,90	0,500	154 - 240
16MnCr5	0,17	0,28	1,15	0,95	0,00	0,1 - 0,7	880	1,00	0,40	4 - 184
						0,5 - 0,7	900			
20MnCr5	0,20	0,28	1,25	1,15	0,00	0,8 - 1,0	920	1,00	0,425	53 - 163

3. Matematički model (MM)

Do sada je objavljen niz radova koji se bave problematikom matematičkog modeliranja procesa pougljičavanja, a neki od njih višestruko su citirani su u literaturi [2-7]. U ovom radu za potrebe usporedbe s modelom neuronske mreže (NNM) preuzet je matematički model (MM) opisan u radovima [3,4]. Proces pougljičavanja odvija se pri konstantnim temperaturama, umjesto kemijskog potencijala ugljika uvodi se njegova termodinamička aktivnost a_C . Pojam termodinamičke aktivnosti ugljika uvodi se zato što austenit nije idealna čvrsta otopina, odnosno aktivnost ugljika nije linearno proporcionalna koncentraciji tj. sadržaju ugljika u čeliku. Slika 2a prikazuje kvantitativni odnos između koncentracije i termodinamičke aktivnosti ugljika pri konstantnoj temperaturi za binarni sustav Fe–C (nelegirani čelici). Standardno stanje ($a_C = 1,0$) je grafit, što odgovara liniji S' - E' u dijagramu ravnotežnog stanja.



Slika 2: a) Odnos između termodinamičke aktivnosti i koncentracije ugljika u austenitu, b) shematski prikaz matematičkog modela (MM) pougljičavanja [3,4]

Većina čelika za cementiranje sadrži legirajuće elemente koji na različite načine utječu na termodinamičku aktivnost ugljika u austenitu. Na primjer, Si i Ni povećavaju termodinamičku aktivnost ugljika u austenitu, dok Cr, Mo i Co smanjuju termodinamičku aktivnost ugljika u austenitu. Utjecaj legirajućih elemenata može se izračunati primjenom poznatih koeficijenata međudjelovanja. Na taj način moguće je odrediti odnos između koncentracije ugljika u binarnom sustavu Fe–C i koncentracije ugljika u legiranom čeliku pri konstantnoj vrijednosti termodinamičke aktivnosti ugljika. Uzimajući u obzir navedeni koncept, matematički model (MM) temelji se na zakonima raspodjele aktivnosti ugljika, Slika 2b.

Drugi Fickov zakon definira vremensku raspodjelu termodinamičke aktivnosti ugljika u čeliku:

$$\frac{\partial a_C}{\partial t} = D_C^a \frac{\partial^2 a_C}{\partial x^2} \quad (3)$$

Koeficijent difuzije ugljika vrijedi za gradijent aktivnosti ugljika. Izračunava se primjenom sljedećih rubnih uvjeta:

- (a) Prvi rubni uvjet odnosi se na promjenu aktivnosti ugljika na granici faza tj. plinske atmosfere i površine čelika:

$$K(a_C^p - a_C^{x=0}) \text{ za } x = 0 \quad (4)$$

- (b) Drugi rubni uvjet odnosi se na proces difuzije koji se odvija u polu beskonačnom tijelu:

$$a_C^{x,t} = a_C^0 \text{ za } x = \infty. \quad (5)$$

Ako se proces odvija u skladu sa zakonima raspodjele termodinamičke aktivnosti ugljika, koeficijenti K i ne ovise o veličini termodinamičke aktivnosti ugljika. To znači da se njihove vrijednosti ne mijenjaju tijekom procesa. Time se rješenje modela znatno pojednostavljuje. Eksplicitno rješenje daje raspodjelu termodinamičke aktivnosti ugljika, uzimajući u obzir sve parametre:

$$a_C^{x,t} = a_C^0 + (a_C^p - a_C^0) \cdot \left(\operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_C^a \cdot t}} - \exp \frac{(K \cdot x + K^2 \cdot t)}{D_C^a} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{D_C^a \cdot t}} + K \sqrt{\frac{t}{D_C^a}} \right) \right). \quad (6)$$

U sljedećem koraku rješenje se izražava kao profil koncentracije ugljika u pougljičenom sloju, budući da se te vrijednosti zahtijevaju i kontroliraju nakon pougljičavanja. Koriste se već poznati odnosi između termodinamičke aktivnosti i koncentracije ugljika, odnosno molarnog udjela ugljika (N_C):

$$\log a_C = \frac{2295}{T} - 0,863 + 0,15 \%C + \log N_C \quad (7)$$

$$N_C = \frac{\frac{\%C}{12,01}}{\frac{\%C}{12,01} + \frac{100 - \%C}{55,85}}$$

Za legirane čelike također se koristi Gunnarsonova jednačba [6], koja se odnosi na utjecaj legirajućih elemenata:

$$\log\left(\frac{c^{\text{Fe-C}}}{c^{\text{Leg}}}\right)_{a_c} = 0,055 \% \text{Si} - 0,013 \% \text{Mn} - 0,04 \% \text{Cr} + 0,014 \% \text{Ni} \quad (8)$$

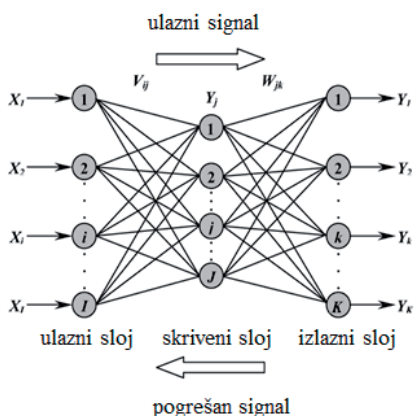
Na taj način može se izračunati teorijski profil koncentracije ugljika za bilo koju vrstu čelika pri određenim uvjetima pougljičavanja.

4. Model neuronske mreže (NNM)

Umjetne neuronske mreže (ANN) nadahnute su biološkim živčanim sustavom i njegovom sposobnošću učenja na temelju primjera [8, 11]. Umjesto da slijede skup jasno definiranih pravila koje specificira korisnik, neuronske mreže uče prema unutarnjim pravilima dobivenima iz prezentiranih uzoraka. Najčešće korištena arhitektura umjetne neuronske mreže je višeslojna neuronska mreža s povratnim širenjem pogreške (engl. *backpropagation*). Algoritam povratnog širenja pogreške razvijen je generalizacijom Widrow-Hoffovog pravila učenja na višeslojne mreže i nelinearne diferencijabilne prijenosne funkcije [9]. Ulazni vektori i pripadajući ciljni vektori koriste se za treniranje mreže sve dok ona ne bude sposobna aproksimirati funkciju, odnosno povezati ulazne vektore s odgovarajućim izlaznim vektorima. Standardna višeslojna neuronska mreža s povratnim širenjem pogreške je algoritam gradijentnog spusta, kao i Widrow-Hoffovo pravilo učenja, pri čemu se težine mreže pomiču u smjeru negativnog gradijenta funkcije pogreške. Pojam “povratno širenje” odnosi se na način izračuna gradijenta u nelinearnim višeslojnim mrežama. Višeslojne neuronske mreže s povratnim širenjem pogreške često imaju jedan ili više skrivenih slojeva s sigmoidnim neuronima, nakon kojih slijedi izlazni sloj s linearnim neuronima. Višestruki slojevi neurona s nelinearnim prijenosnim funkcijama omogućuju mreži učenje nelinearnih i linearnih odnosa između ulaznih i izlaznih vektora. Postoje brojne varijacije osnovnog algoritma temeljene na drugim standardnim optimizacijskim tehnikama, poput metode konjugiranih gradijenata i Newtonovih metoda. U ovom radu korišten je *feedforward backpropagation* algoritam treniranja, osmišljen za minimizaciju srednje kvadratne pogreške (MSE) između stvarnog (procijenjenog) izlaza (a, A) i željenog (ciljnog) izlaza (d, T). Slika 3. prikazuje princip *feedforward backpropagation* algoritma treniranja a potrebni parametari za učenje neuronske mreže navedi su u Tablici 2 i slici 4.

Osnovni algoritam učenja neuronske mreže može se sažeti na sljedeće korake:

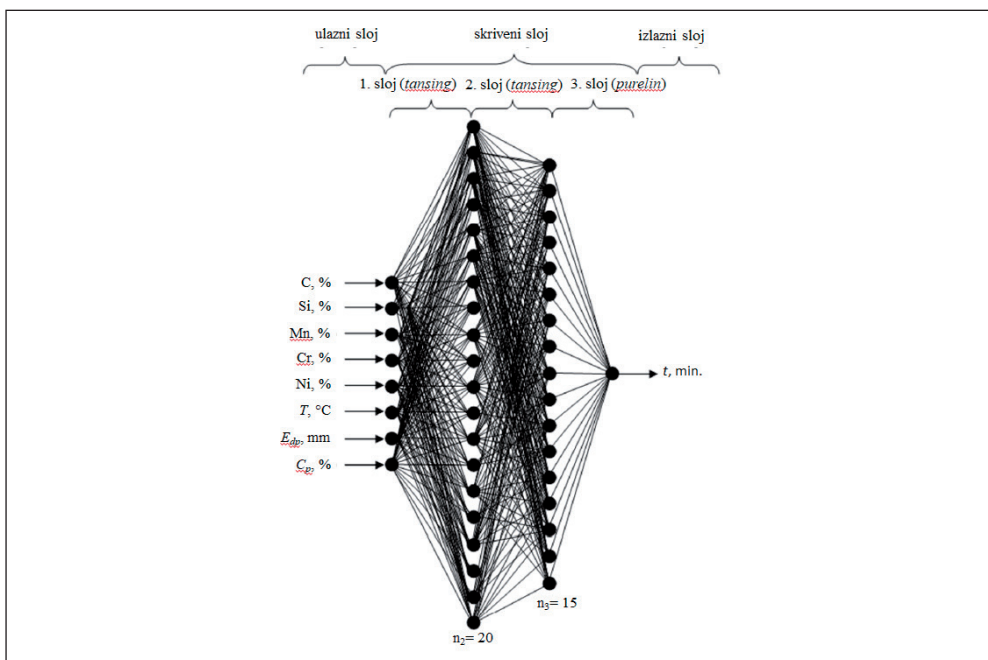
Korak 1. Postavljanje inicijalnih težina V_{ij} and W_{jk} .



Parametar	Vrijednost
Cilj performansi	0,0001
Brzina učenja	0,01
Omjer povećanja brzine učenja	1,05
Omjer smanjenja brzine učenja	0,5
Najveće povećanje performansi	1,04
Najmanje smanjenje performansi	$1e^{-10}$
Konstanta momenta	0,9
Broj slojeva	3
Broj neurona	20-15-1
Funkcija prijenosa	Tansig & tansig & purelin
Broj epoha treniranja	15.000

Slika 3: Princip *feedforward* backpropagation algoritma treniranja

Tablica 2: Parametri učenja neuronske mreže



Slika 4: Pojednostavljeni model korištene neuronske mreže

Korak 2. Izračunati izlaze svih neurona sloj po sloj, počevši od ulaznog sloja, kako je prikazano u nastavku:

$$net_j = \sum_{i=1}^I V_{ij} X_i, \quad j = 1, 2, 3, \dots, J - 1, \quad i = 1, 2, 3, \dots, I \tag{9}$$

$$Y_j = f(\text{net}_j) \quad (10)$$

$$\text{net}_k = \sum_{j=1}^J W_{jk} Y_j, \quad j = 1, 2, 3, \dots, J - 1, \quad k = 1, 2, 3, \dots, K \quad (11)$$

$$Y_k = f(\text{net}_k) \quad (12)$$

Gdje su:

- V_{ij} - težina između ulaznog sloja i skrivenog sloja,
- W_{jk} - težina između skrivenog sloja i izlaznog sloja,
- X_i - ulazni signali (vrijednosti kemijskog sastava),
- i - broj neurona ulaznog sloja,
- I - broj ulaza neurona j u skrivenom sloju,
- Y_j - izlaz skrivenih neurona,
- j - broj neurona skrivenog sloja,
- J - broj ulaza neurona k u izlaznom sloju,
- Y_k - izlazni signali (masa eluiranih iona po gramu uzorka),
- k - broj neurona izlaznog sloja.

U slučaju sigmoidne prijenosne funkcije skrivenog sloja, primjenjuje se sljedeća jednadžba:

$$f(x) = \frac{2}{1+e^{-x}} \quad (13)$$

Korak 3. Izračunati pogrešku sustava E:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K (d_k - a_k)^2 \quad (14)$$

gdje K predstavlja ukupan broj uzoraka, d_k željene izlaze (eksperimentalne vrijednosti), a_k stvarne izlaze.

Korak 4. Ako je pogreška E dovoljno mala ili je broj iteracija prevelik, zaustaviti proces učenja.

Korak 5. Izračunati pogreške učenja za svaki neuron sloj po sloj:

$$\delta_k = (d_k - a_k) f'(\text{net}_k), \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (15)$$

$$\delta_k = \sum_{j=1}^K W_{jk} \delta_j f'(\text{net}_j), \quad j = 1, 2, \dots, J-1, k = 1, 2, \dots, K. \quad (16)$$

Korak 6. Ažurirati težine funkcije pogreške E.

$$W_{jk}(n+1) = W_{jk}(n) + l_r \delta_k Y_j + \alpha(W_{jk}(n) - W_{jk}(n-1)) \quad (17)$$

$$V_{ji}(n+1) = V_{ji}(n) + l_r \delta_j X_{ji} + \alpha(V_{ji}(n) - V_{ji}(n-1)) \quad (18)$$

gdje jesu l_r - koeficijent učenja, α - momentum, n - broj tekuće iteracije.

Korak 7. Ponoviti postupak od Koraka 2.

Za procjenu učinkovitosti algoritma učenja u rješavanju zadanog zadatka definiran je indeks učinkovitosti kao što je prikazano na slici 5. Indeks učinkovitosti omogućuje usporedbu primijenjenog algoritma neuronske mreže s drugim algoritmima učenja. Najčešći indeks učinkovitosti je normalizirana srednja kvadratna pogreška (NRMSE) [7]:

$$NRMSE = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (d_n - a_n)^2}{N}}}{\sigma_{d_n}} \quad (19)$$

$$\sigma_{d_n} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (d_n - \bar{d})^2} \quad (20)$$

$$\bar{d} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N d_n, \quad (21)$$

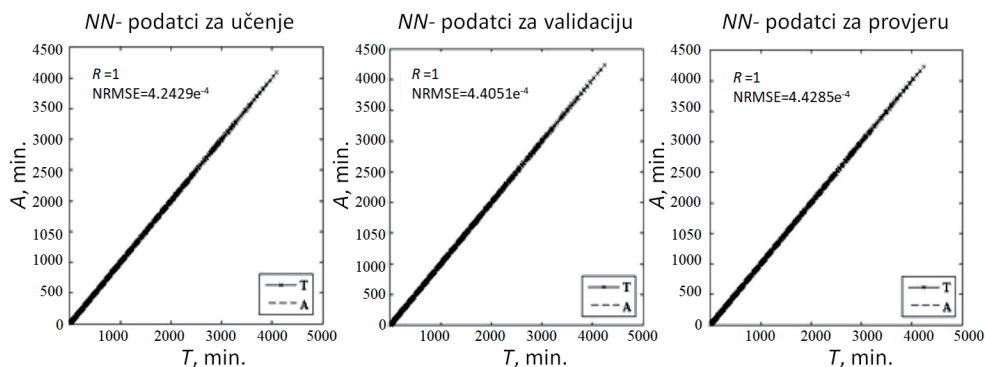
gdje su:

N - ukupan broj uzoraka,

d_n - željeni (*target*, T) izlaz,

a_n - stvarni (procijenjeni, A) izlaz,

σ_{d_n} - standardna devijacija.

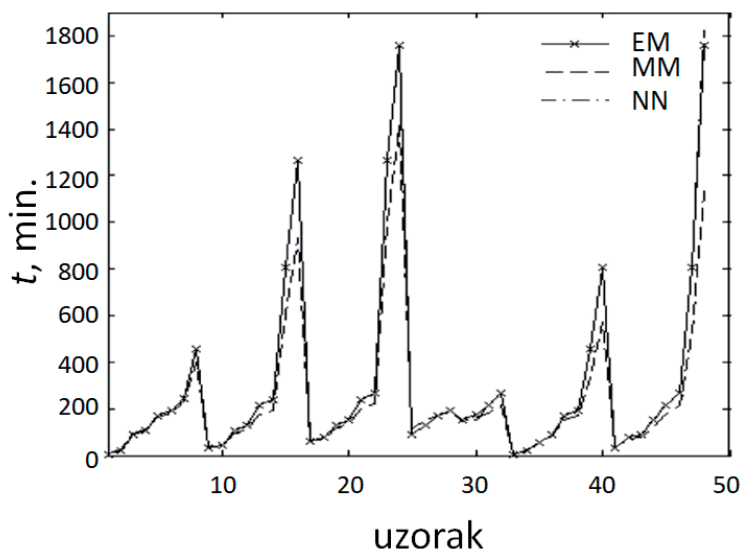


Slika 5: Pokazatelj uspješnosti (NRMSE) trenirane neuronske mreže

Tablica 3: Usporedba vrijednosti vremena pougljičava dobivenih modelom EM- MM- NM

Oznaka čelika	Parametri pougljičavanja			K min/h	Vrijeme, min				
	T , °C	E_{dp} , mm	C_p , %		EM	MM	ΔMM , %	NN	ΔNN , %
C10	880	0,10	1,20	0,3511	5	9	+80,0	5	0,0
		0,20	1,20	0,3511	19	25	+316	20	+5,3
	900	0,50	1,15	0,4109	89	93	+45	89	0,0
		0,55	1,15	0,4109	108	110	+19	107	-0,9
	920	0,80	1,15	0,4744	171	161	-5,8	171	0,0
		0,85	1,15	0,4744	193	180	-6,7	193	0,0
940	1,10	1,10	0,5447	245	230	-6,1	245	0,0	
	1,50	1,10	0,5447	455	400	-12,1	455	0,0	
C15	880	0,25	1,20	0,3511	30	32	+67	31	3,3
		0,30	1,20	0,3511	44	43	+23	44	0,0
	900	0,55	1,15	0,4109	108	97	-10,2	107	-0,9
		0,60	1,15	0,4109	128	4	-10,9	128	0,0
	920	0,90	1,15	0,4744	216	176	18,5	216	0,0
		0,95	1,15	0,4744	241	194	-19,5	241	0,0
940	2,00	1,00	0,5447	809	610	-24,6	809	0,0	
	2,50	1,00	0,5447	1264	930	-26,4	1264	0,0	

14NiCr14	880	0,35	1,20	0,3511	60	58	-33	60	0,0
		0,40	1,20	0,3511	78	74	-5,1	78	0,0
	900	0,60	1,15	0,4109	128	117	8,6	128	0,0
		0,65	1,15	0,4109	150	135	-10,0	150	0,0
	920	0,95	1,15	0,4744	241	199	-17,4	241	0,0
		1,00	1,15	0,4744	267	219	18,0	266	-0,4
	940	2,50	1,00	0,5447	1264	997	21,1	1264	0,0
		3,00	1,00	0,5447	1760	1416	-19,5	1752	-0,5
15NiCr6	900	0,50	0,80	0,4109	89	110	+23,6	89	0,0
		0,60	0,80	0,4109	128	153	+19,5	128	0,0
	920	0,80	0,90	0,4744	171	171	0,0	171	0,0
		0,85	0,95	0,4744	193	190	1,6	193	0,0
18NiCr5	900	0,65	0,90	0,4109	150	144	-4,0	150	0,0
		0,70	0,90	0,4109	174	165	-5,2	150	-13,8
	920	0,90	1,00	0,4744	216	178	-17,6	216	0,0
		1,00	1,00	0,4744	267	216	19,1	267	0,0
16MnCr5	880	0,10	1,00	0,3511	5	9	+80,0	4	-20,0
		0,20	1,00	0,3511	19	24	+263	20	+5,3
	900	0,40	1,00	0,4109	57	57	0,0	56	-1,8
		0,50	1,00	0,4109	89	84	-5,6	89	0,0
	920	0,80	0,90	0,4744	171	150	12,3	171	0,0
		0,85	0,90	0,4744	193	170	-1	193	0,0
	940	1,50	1,05	0,5447	455	355	-26,4	455	0,0
		2,00	1,05	0,5447	809	574	-29,0	809	0,0
20MnCr5	880	0,25	1,00	0,3511	30	30	0,0	32	+67
		0,40	1,00	0,3511	78	69	-	8	0,0
	900	0,50	1,00	0,4109	89	16	-14,6	88	-1,1
		0,65	1,00	0,4109	150	122	18,7	151	+0,7
	920	0,90	0,90	0,4744	216	175	-19,0	216	0,0
		1,00	0,90	0,4744	267	213	-20,2	266	-0,4
	940	2,00	1,05	0,5447	809	521	-35,6	808	-0,1
		3,00	0,05	0,5447	1760	1131	-35,7	1820	+3,4



Slika 6: Grafička usporedba procjena vremena pougljičavanja dobivenih EM, MM i NN modelima

5. Eksperimentalni dio

Modeliranje neuronske mreže temelji se na stvarnom empirijskom modelu (EM) opisanom u poglavlju 2. Jednadžba (2) korištena je za izračun vremena cementiranja t za čelike navedene u Tablici 1, za različite kombinacije kemijskog sastava (%C, %Si, %Mn, %Cr, %Ni), temperature T , dubine cementiranja E_{dp} i C-potencijala C_p . Iz jednadžbe (2) proizlazi da je vrijeme cementiranja:

$$t = f[\%C, \%Si, \%Mn, \%Cr, \%Ni, E_{dp}, C_p, K = f(T)], h \quad (22)$$

Faktor proporcionalnosti je funkcija temperature T , a za gornje područje prikazano na Slici 1. iznosi:

$$K = 0.0000000628725T^3 - 0.0001650877376T^2 + 0.1474365831237t - 44.39503666158371 \quad (23)$$

Ulazni skup podataka za treniranje neuronske mreže definiran je u skladu s jednadžbama (22) i (23), prema pravilima navedenima u nastavku:

Pravilo 1: $T = [850 \text{ °C} \cdots 940 \text{ °C}]$ STEP1,

Pravilo 2: $E_{dp} = [0,1 \text{ mm} \cdots 3,0 \text{ mm}]$ STEP 0.05,

Pravilo 3: Ako je $E_{dp} \geq 0,1$ i $E_{dp} \leq 0,4$ onda je $C_p = 1,2\%$

Pravilo 4: Ako je $E_{dp} \geq 0,4$ i $E_{dp} \leq 1,0$ onda je $C_p = 1,15\%$

Pravilo 5: Ako je $E_{dp} \geq 1,0$ i $E_{dp} \leq 3,0$ onda je $C_p = 1,07\%$

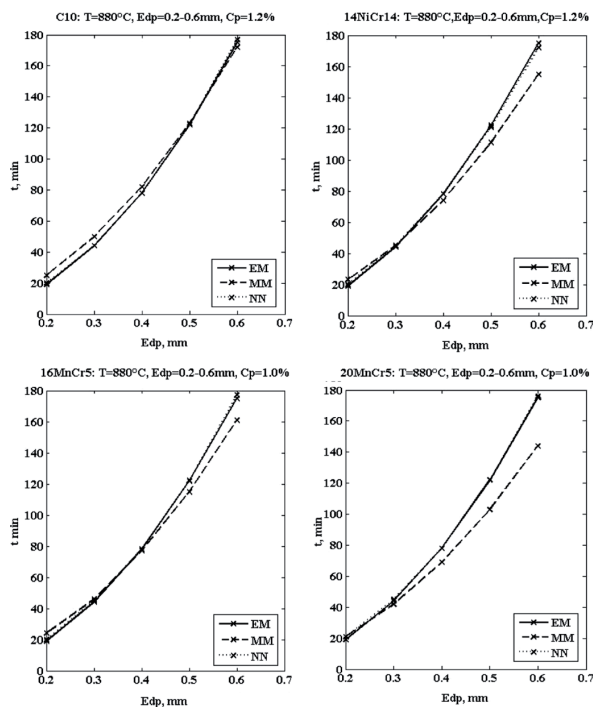
Tablica 4: Usporedba trajanja pougljičavanja za parametre $T = 880$ °C, $E_{dp} = 0,2$ do $0,6$ mm, $C_p = 1,0\%$ i $C_p = 1,2\%$

Oznaka čelika	Parametri pougljičavanja			K mm/\sqrt{h}	Vrijeme, min.				
	$T, ^\circ C$	E_{dp} , mm	$C_p, \%$		EM	MM	$\Delta MM, \%$	NN	$\Delta NN, \%$
C10	880	0,2	1,20	0,3511	19	25	+31,6	20	+5,3
		0,3			44	50	+13,6	44	0
		0,4			78	82	+5,1	78	0
		0,5			122	123	+0,8	122	0
		0,6			175	172	-1,7	177	+1,1
14NiCr14		0,2	1,00		23	+21,1	20	+5,3	
		0,3			45	+2,3	45	+2,3	
		0,4			74	-5,1	78	0	
		0,5			111	-9,0	121	-0,8	
		0,6			155	-11,4	172	-1,7	
16MnCr5		0,2	1,00		19	+26,3	20	+5,3	
		0,3			44	+4,5	45	+2,3	
		0,4			78	-1,3	78	0	
		0,5			122	-5,7	122	0	
		0,6			1675	-8,0	177	+1,1	
20MnCr5	0,2	1,00	21	+10,5	21	+10,5			
	0,3		42	-4,5	45	+2,3			
	0,4		69	-11,5	78	0			
	0,5		103	-15,6	122	0			
	0,6		144	-17,7	176	+0,6			

Napomena: EM- vrijednosti trajanja dobivene empirijskim modelom, MM - vrijednosti trajanja dobivene matematičkim modelom, NN - vrijednosti trajanja dobivene modelom neuronske mreže, $\Delta MM = ((MM/EM)-1) \cdot 100$, $\Delta NN = ((NN/EM)-1) \cdot 100$

Ako se primijene prethodno definirana pravila, veličina ulazno-izlaznog skupa podataka za treniranje neuronske mreže iznosi 19.076 zapisa. U radu je provedeno ispitivanje troslojne (20-15-1) *feedforward back propagation* neuronske mreže, čiji je pojednostavljeni model prikazan na Slici 4. Ulazni sloj sastoji se od podataka o kemijskom sastavu čelika (%C, %Si, %Mn, %Cr, %Ni), dubini cementiranja E_{dp} i C-potencijalu C_{pot} . Izlazni sloj sastoji se od podataka o vremenu cementiranja t . Za modeliranje je korišten MathWorks Neural Network Toolbox, verzija 4.0.1 [9], prema čijim su pravilima označeni skriveni slojevi mreže. Kao prijenosna funkcija prvog i drugog skrivenog sloja primijenjena je sigmoidna funkcija (tansig), a za treći

skriveni sloj primijenjena je funkcija linearnog tipa (purelin). Kao funkcija treniranja primijenjena je *traingdx*- metoda gradijentnog spusta s momentom i prilagodljivom brzinom učenja (engl. *backpropagation*). Parametri treniranja neuronske mreže prikazani su u Tablici 2. Zbog relativno velikog broja ulazno- izlaznih podataka za treniranje, bilo je moguće definirati zasebne skupove podataka (50 % za treniranje, 25 % za validaciju, 25 % za testiranje) tijekom procesa treniranja te primijeniti metodu ranog zaustavljanja (engl. *early stopping*) radi poboljšanja sposobnosti generalizacije mreže. Slika 5 daje grafički prikaz pokazatelja uspješnosti treniranih neuronskih mreža za sva tri skupa ulazno-izlaznih podataka. Za prethodno navedene čelike i eksperimentalne temperature cementiranja iz Tablice 1, generirano je 48 zapisa različitih kombinacija vrijednosti dubine cementiranja E_{dp} i C-potencijala C_{pot} slučajnim odabirom. Vrijednosti vremena cementiranja izračunate su primjenom matematičkog modela (MM) i modela neuronske mreže (NNM). Te vrijednosti, odnosno vremena cementiranja dobivena svakim modelom (MM, NNM), kao i njihove razlike (ΔMM %, ΔNN %) u odnosu na empirijski model (EM), prikazane su u Tablici 3. Grafička usporedba točnosti procjene vremena cementiranja (Tablica 3) dobivene empirijskim modelom te matematičkim i NN modelom prikazana je na Slici 6. Slika 7 prikazuje točnost procjena vremena cementiranja za svaki čelik zasebno, uzimajući u obzir dubinu cementiranja E_{dp} navedenu u Tablici 3.



Slika 8: Grafička usporedba procjene vremena pougljičavanja za $T = 880$ °C, $E_{dp} = 0,02 - 0,06$ mm, $C_p = 1,0$ % i $C_p = 1,2$ %

6. Zaključak

Osnovni cilj ovog rada jest istraživanje i modeliranje strukture neuronske mreže koja bi s dovoljnom točnošću procjenjivala potrebno vrijeme cementiranja za različite kemijske sastave čelika i različite parametre procesa cementiranja, kako bi se izbjeglo provođenje dodatnih eksperimenata za određivanje tih parametara. Istražena je mogućnost primjene neuronske mreže za procjenu vremena pougljičavanja. Provedena je usporedba dobivenih rezultata s empirijskim (EM) i matematičkim modelom (MM). Ključ uspješne procjene ili aproksimacije određenih podataka pomoću neuronske mreže jest njezina sposobnost aproksimacije podataka koji nisu korišteni kao parametri treniranja, odnosno podataka na kojima mreža nije trenirana. Modelirana (20-15-1) *feedforward backpropagation* neuronska mreža sa strukturom prikazanom na Slici 4 i parametrima navedenima u Tablici 2 pokazala je vrlo dobru aproksimaciju skupa podataka za treniranje (50 % podataka, $R = 1$, $\text{NRMSE} = 4,2429\text{e}-004$) te validacijskog skupa podataka (25 % podataka, $R = 1$, $\text{NRMSE} = 4,4051\text{e}-004$), koji su korišteni tijekom procesa treniranja neuronske mreže. Vrlo dobra aproksimacija vremena pougljičavanja dobivena je i na trećem, testnom skupu podataka, tzv. "nikad viđenim" podacima (25 % podataka, $R = 1$, $\text{NRMSE} = 4,4385\text{e}-004$). Na temelju empirijskih podataka iz Tablice 1, generirani su podaci o potrebnim vremenima pougljičavanja i prikazani u Tablici 3. te su uspoređeni s rezultatima procijenjenog vremena (t) dobivenim matematičkim modelom (MM, stupac 7) i numeričkim NN modelom (stupac 9) te s vrijednostima dobivenim empirijskim modelom (EM, stupac 6). Stupci 8 i 10 prikazuju odstupanja matematičkog i NN modela izražena u postocima ($\Delta\text{MM} \%$ i $\Delta\text{NN} \%$) u odnosu na EM. Može se uočiti da je odstupanje NN modela znatno manje (uglavnom ispod $\pm 10\%$) nego odstupanje MM modela (uglavnom iznad $\pm 10\%$). Odstupanja u procjeni vremena pougljičavanja grafički su prikazana na Slici 6, gdje je jasno vidljivo da su NN model i EM u dobroj suglasnosti, dok MM to nije. Iz Tablice 3 može se uočiti da MM pokazuje znatno veća odstupanja od EM-a u vrijednostima vremena pougljičavanja s porastom dubine pougljičavanja E_{dp} ispitivanih čelika. Na temelju podataka iz Tablice 3, odstupanja u vremenu pougljičavanja za svaki tip čelika prikazana su na Slici 7. Može se uočiti da se veća odstupanja MM modela javljaju pri dubini pougljičavanja $E_{dp} > 0,06$ mm, dok su odstupanja u rasponu dubina $0,2 \text{ mm} < E_{dp} < 0,6$ mm (približno) manjeg stupnja. Rezultati i usporedba procjene vremena pougljičavanja za raspon $0,2 \text{ mm} < E_{dp} < 0,6$ mm prikazani su u Tablici 4 i na Slici 8. Prikazani rezultati odnose se na čelike C10, 14NiCr14, 16MnCr5 i 20MnCr5. Ti čelici, kako je prikazano na Slici 7, pokazuju manji stupanj odstupanja u navedenom rasponu dubina pougljičavanja. U slučaju manjih dubina pougljičavanja MM također pokazuje značajna odstupanja od EM-a, ali ne u tolikoj mjeri kao kod većih dubina pougljičavanja. NN model se također pokazao boljim modelom za procjenu, odnosno aproksimaciju potrebnog vremena pougljičavanja u slučaju manjih dubina pougljičavanja. Autori smatraju da se odstupanje u procjeni vremena pougljičavanja do $\pm 10\%$ u odnosu na empirijsku procjenu može smatrati prihvatljivim. Prema rezultatima navedenima u Tablici 3, prosječno odstupanje MM modela u procjeni

vremena pougljičavanja pri većim dubinama pougljičavanja prelazi $\pm 10\%$ u odnosu na EM, dok je za manje dubine (Tablica 4) prosječno odstupanje približno $\pm 10\%$. S odstupanjima znatno ispod $\pm 10\%$, NN model se pokazao boljim modelom i u prvom i u drugom slučaju razmatranih dubina pougljičavanja. Autori smatraju da se nadmoć NN modela nad MM modelom može objasniti nedostatnošću Gunnarsonove formule (jednadžba 8). Analiza MM modela pokazala je da Gunnarsonova formula, koja uzima u obzir utjecaj legiranih elemenata, ima najveći utjecaj na procjenu vremena pougljičavanja. Očito je da su koeficijenti korišteni u Gunnarsonovoj formuli dobiveni eksperimentalno, na ograničenom skupu podataka, koji nije bio dovoljno opsežan da obuhvati sve "nevidljive" interakcije koje se javljaju tijekom procesa pougljičavanja. Bolja procjena vremena pougljičavanja dobivena pomoću NN modela za veće i manje dubine pougljičavanja rezultat je činjenice da NN model bolje obuhvaća "nevidljive" interakcije procesa pougljičavanja.

Te su interakcije zapravo integrirane u empirijsku funkciju $F = f(T)$ danu u jednadžbi (23). Zaključno, sve bolji rezultati u procjeni vremena pougljičavanja primjenom NN modela postići će se uključivanjem sve većeg broja eksperimentalnih rezultata, dobivenih na čelicima različitog sastava i pri različitim parametrima pougljičavanja, u proces treniranja neuronske mreže.

8. Literatura

- [1] Wyss, U.: *Principes De La Cementation Gazeuse, Härterei Technik*, Lausanne, 1982
- [2] Paviosoglou, J.: Das Erstellen von mathematischen Modellen und die Anwendung derartiger Modelle bei der Gasaufkohlung, *Härterei-Technische Mitteilungen*, **32** (1977) 4, 169-176 i 32, 215-223
- [3] Stupnišek, M.; Koroušić, B., Dobovišek, B.: Beitrag zur Modellieren des Gasaufkohlungsprozesses von Stahl, *Proceedings of the 3rd Int. Congress on Heat Treatment of Materials*, Shanghai, November 7-11, 1983. Session 7., 23-28., The Camenon Press Limited, London, 1984
- [4] Stupnišek, M.; Virag, Z.: Novi matematički model plinskog pougljičavanja čelika, *Zbornik radova, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture*, Zagreb, 1982, 85-99
- [5] Wüning, J.: Processrechner zur Steuerung des Diffusionsverlaufs während der Aufkohlung: *Zeitschrift für wirtschaftliche Fertigung*, **77** (1982) 9, 424-426
- [6] Hiremath, P.; Gurumurthy, B. M., Shivaprakash, Y. M., Naik, N., Jain, P., Kowshik, S., Murthy, B. R. N.: Elevating carbon diffusion: deciphering the interplay of alloy composition and carburizing treatment in low carbon steels, *Cogent Engineering*, **11** (2024) 1, 2345847, <https://doi.org/10.1080/23311916.2024.2345847>
- [7] Maisuradze, M. V.; V. Yudin, Y. V., Kuklina, A. A., Abakumov, K. V.: Methodology for Predicting the Results of Carburizing of Alloy Steels, *Steel in Translation*, **55** (2025) 10, 1041-1049, <https://doi.org/10.3103/S096709122570192X>

-
- [8] Yingtao, Zh.; Zirong, T., Lei, H., Mahdipanah, M.H., Yanjie, W.: Real-time prediction method of carbon concentration in carburized steel based on a BP neuralnetwork, *Heat Treatment and Surface Engineering*, **6** (2024) 1, 2331865, <https://doi.org/10.1080/25787616.2024.2350184>
- [9] Golden, R. M.: *Mathematical Methods for Neural Networks Analysis and Design*, A Bradford Book; The MIT Press: Massachusetts, 1996., <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:62133699>, *Pristupljeno*: 2026-03-11
- [10] Raissi, M.; Perdikaris, P., Karniadakis, G.E.: Physics-informed neural networks, A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, **378** (2019) 686-707, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- [11] The MathWorks, Neural Network Toolbox, Release 4.0.1, 2003, www.mathworks.com, *Pristupljeno*: 2007-09-01
- [12] Hagan, T. M.; Demuth, B. H., Beale, H. M.: *Neural Network Design*; PWS Publishing Company: ISBN-0534943322, Boston, 1995