

Developing the evolutionary vacancy migration energy prediction system

Desarrollar el sistema de predicción de energía de migración de vacantes evolutivas

Alizo Ellner¹, Beate Steve², Mundó Mabel³

¹Department of Statistics, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina

²Department of Mathematics, Universidad Nacional de Cuyo, Argentina

³Department of Mathematics, Universidad Nacional de Rio Cuarto, Argentina

Abstracto

La transformación de fase en general, y la precipitación de solutos en particular, son fenómenos físicos espontáneos que pueden ocurrir durante el funcionamiento en materiales estructurales, p. aceros, y modifican drásticamente sus propiedades mecánicas, amenazando así la seguridad del componente afectado.

Palabras clave: transformación de fase, precipitación de solutos, energía de migración, lógica difusa

Abstract

Phase transformation in general, and solute precipitation in particular, are spontaneous physical phenomena that may occur during operation in structural materials, e.g. steels, and dramatically modify their mechanical properties, thereby threatening the safety of the affected component.

Keywords: Phase transformation, solute precipitation, Migration Energy, Fuzzy Logic

1.Introducción

Transformación de fase en general y precipitación de solutos en particular, son fenómenos físicos espontáneos que puede ocurrir durante la operación en materiales estructurales, p. aceros, y modificar drásticamente su mecánica propiedades, lo que amenaza la seguridad de los afectados componente[1]. Modelos que describen de forma fiable la cinética de estos fenómenos son, por tanto, de importancia para la explotación segura de centrales nucleares industriales. por ejemplo, la formación de precipitados ricos en cobre y los nanohuecos bajo irradiación de neutrones son ampliamente aceptados ser la principal causa de endurecimiento y fragilización de aceros para recipientes a presión de reactores nucleares (RPV) durante operación[2], como consecuencia de su actuación como obstáculos al movimiento de dislocación. Evidencias experimentales han destacado que cualquier modelo para el predicción del endurecimiento del acero RPV frente a la dosis de radiación (que es el requisito básico para la vida útil del RPV evaluación) necesita poder contabilizar tan correctamente como posible para la acumulación de precipitado de Cu y Cuvacancy densidad compleja[3].

Simulaciones Atomistic Kinetic Monte Carlo (AKMC) se encuentran entre las herramientas más adecuadas para estudiar precipitación de Cu en Fe a través de una migración de vacantes mecanismo, como una subparte del estudio general de RPV aceros evolución a largo plazo tras décadas de funcionamiento[4]. AKMC es un compromiso entre Molecular Dynamics (MD), que considera eventos en el tiempo atómico y escala de longitud y herramientas de grano grueso, como Objeto KMC y la teoría de tasas, que son necesarios para ampliar la simulación a la escala macroscópica. AKMC técnicas conservan la descripción de nivel atómico, pero Reducir el número de posibles eventos a lo más básico. mecanismos de difusión de un solo defecto y por lo tanto puede abarcan un período de tiempo (mucho) mayor que MD[5].

2.Revisión de literature

La muestra un ejemplo de simulación AKMC. los La caja cúbica está llena de átomos de Fe de matriz y contiene una pequeño porcentaje de Cu. Los átomos están dispuestos en 3D. cuadrícula rígida de coordenadas que corresponde al cuerpo Estructura cristalográfica cúbica centrada (BCC)[6]. Varios Sin embargo, los sitios están vacíos, lo que corresponde a vacantes. A cada paso del cálculo, uno de ellos se mueve como se muestra [7]. Cada vacante tiene ocho posibles destinos, correspondientes a las ocho esquinas del Células BCC. Uno de todos los saltos candidatos, cuyo número es ocho veces el número de vacantes presentes en el sistema, se selecciona de acuerdo con su probabilidad, utilizando el Método de muestreo de Monte Carlo.

La probabilidad de salto de vacante, p_j , se calcula utilizando el teoría clásica de la tasa de transición, es decir, utilizando un método de Arrhenius expresión para la frecuencia de salto, que describe el salto como proceso térmicamente activado[8].

Un paso AKMC correspondiente a la migración de un vacante (en realidad, es más bien uno de sus átomos vecinos el que migra a él). La figura muestra la migración de los eclosionados. átomo a la vacante, situado en la esquina inferior izquierda frontal de su Célula cúbica BCC, en líneas simples. La línea discontinua muestra el BCC celda de destino[9].

Aquí v_0 , j es un prefactor que se supone constante y del orden de la frecuencia Debye para Fe (en el presente caso), k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta y E es la migración de vacantes Energy (VME), que es el parámetro clave a ser evaluado y el enfoque del presente trabajo. Un preciso La definición y descripción de estos últimos se dan en sección[10]. Por el momento, es importante saber que el VME depende de la configuración atómica local (LAC) y que se puede calcular rigurosamente con MDtype herramientas. † Sin embargo, este es un proceso que requiere mucho tiempo. operación, que no se puede llevar a cabo en todos los Paso AKMC. Nuestro proyecto, por tanto, está dirigido a Reemplazando este riguroso cálculo por una herramienta de regresión, entrenados para predecir el VME sobre la base de un número de ejemplos calculados por MD. Dos posibilidades se han previsto y se informan en las secciones[11]. El objetivo es poder calcular el VME cientos de miles de millones de veces en un período de tiempo razonable, con la menor cantidad de simplificaciones posible, porque del papel crucial que juega el VME en el tiempo incremento del AKMC, y por tanto en la predicción de la cinética del proceso simulado[12].

Para mantener las calidades de la herramienta de aproximación en control, una evaluación de riesgos basada en lógica difusa (FL) También se ha desarrollado un método para determinar la probabilidad de que una predicción de VME esté sujeta a una error irrazonablemente alto[13]. Tal herramienta permite construcción del sistema evolutivo mostrado en. Los VME rechazados se calculan en MD, antes de agregar esta nueva información en la base de datos existente. Una vez el Este último se ha llenado con una cierta cantidad de nuevos entradas, tanto la herramienta de aproximación como su riesgo FL El módulo de evaluación se puede volver a capacitar automáticamente. Esta estrategia promete mejorar el VME calidades de predicción durante el AKMC. El módulo FL se describe en la sección[14].

Consideraciones físicas que sugieren la conveniencia de este esquema y algunos resultados preliminares, obtenidos con primeros algoritmos rudimentarios, con solo algunas pistas sobre la arquitectura de las herramientas numéricas, se han ya informado. Aquí nos centramos en el descripción detallada y discusión del algoritmo parte, presentada en su forma más reciente[15].

El VME es la diferencia entre la energía más grande encontrado durante el proceso que conduce al intercambio entre una vacante y un átomo cercano (punto silla) y la energía inicial del sistema, como se ilustra en la figura 4. El VME se puede estimar de varias formas[16]. Fórmulas empíricas basadas en la diferencia energética total (ΔE) son los más sencillos de aplicar, sino también los más aproximados, como se discute también en Arbitro. Se pueden realizar cálculos rigurosos con métodos como "arrastrar", "atenuador" o "elástico empujado Band "unos[17]. El lector interesado puede encontrar un encuesta sobre ese tema en la Ref. 18. El método que usamos Era un arrastre refinado con interpolación de splines cúbicos. los la energía total del sistema se calcula con MD realizando un apagado del cristal.

3. Discusión

El VME varía con la configuración atómica local (LAC), como se ilustra. El A, B1, ..., F Los átomos que se muestran además del migrante son los primeros vecinos más cercanos (1nn) de su inicial y final posiciones. Pueden ser de varios tipos químicos o incluso habrá otra vacante. Dependiendo de su naturaleza, la VME correspondiente será diferente. El LAC puede así codificarse bajo la forma de una matriz de enteros[18].

Cada entrada corresponde a un sitio en particular alrededor del salto y el valor que toma depende de la naturaleza del objeto que se encuentra en él. La longitud de la cadena LAC depende de la precisión de la correlación. por ejemplo, la aproximación 1nn que se muestra considera 15 sitios atómicos. Llevando más cerca vecinos en cuenta hace que este número aumente. los lista de posibles valores que pueden tomar los enteros depende del problema físico en cuestión. Hablamos sobre el problema FeAB_Xnn cuando, además del Fe matriz y vacante migrante, tanto A como B las especies pueden encontrarse y participar en la definición el LAC y cuando se utiliza la aproximación Xnn, es decir el LAC se amplía para incluir la X capa de sitios vecinos.

La resume los problemas de interés para el estudio de la aleación binaria FeCu. Está claro que el número de posibles LAC explota rápidamente y que un el cálculo completo con MD es totalmente inviable. Tenga en cuenta que, en la práctica, las simetrías inherentes del BCC La configuración permite que el número total de LAC sea reducido en un factor 6 como máximo. Este "truco", sin embargo, obviamente no elimina la complejidad subyacente mencionado anteriormente.

En consecuencia, nuestro problema es correlacionar el VME con respecto a la entrada de tipo entero (categórico) de 15 a 39 variables. La salida es una función de tipo real suave que toma valores de 0.0 \ddagger a, digamos, 1.5 eV, con el mayor precisión posible. Los parámetros de los métodos de arrastre y enfriamiento se han seleccionado como un compromiso entre velocidad y precisión.

Una expansión de clúster para una aleación puede verse como un Modelo de Ising generalizado. Cualquier propiedad de la aleación, que solo depende de la configuración atómica, el total energía en particular, puede expresarse por medio de tales una expansión. Su aplicación a barreras energéticas (EMV) se ha propuesto. Más precisamente, el Las variables de ocupación de LAC permiten una descripción de la barrera energética como una expansión en términos de polinomios:

La muestra los tipos de interacciones de muchos cuerpos considerado en una expansión, hasta el nn. El Jij Por tanto, los coeficientes representan la contribución de cada estas interacciones con el VME.

Por supuesto, solo un número finito de interacciones puede ser involucrado en la expansión. La elección de qué interacción es más esencial para una expansión particular es una pregunta abierta.

El ajuste de la expansión de cada LAC al El VME calculado por MD correspondiente se realiza mediante ajustando el coeficiente Jij, minimizando el mínimo cuadrado error entre la energía calculada y la predicha energía propuesta por la ampliación. Esta minimización se puede realizar con una optimización tradicional método como Single Value Decomposition (SVD) basado en matriz pseudoinversa, métodos estocásticos como Algoritmos genéticos (GA) o parámetro no lineal encajando como Levenberg-Marquardt (LM).

Se decidió, como primera aproximación, estudiar la rendimiento del método de expansión de clústeres para el problemas binarios simples 1nn. Incluso por esto simple situación era necesario imponer un truncamiento en el expansión al considerar solo muchas interacciones corporales consistía en pares o tripletes de átomos, para evitar el número de términos a explotar.

Esta sección presenta nuestros resultados con el FeCu1nn y Problemas de FeVac1nn, donde el Si Por tanto, las variables de ocupación pueden tomar sólo dos valores. El número de parámetros libres a optimizar, estaba ! $15 + C15 2 + C15 3 = 575$. El porcentaje de puntos utilizados para la formación fue del 20%. El método de optimización aplicado en este trabajo fue GA (SVD y LM dieron similares resultados).

La muestra los resultados obtenidos con el único consideración de parejas. La expansión del clúster VME Las predicciones se comportan claramente bien para el FeCu1nn problema, incluso con un modelo tan simple. El adicional consideración de la interacción triplete, sin embargo, permite reducir el error promedio cometido, como se muestra en. Por el contrario, las predicciones de expansión del clúster la calidad es mucho menos satisfactoria para el FeVac1nn problema.

El problema considerado aquí es el más general y FeCuVac1nn más complicado, donde tanto los átomos de cobre como las vacantes pueden encontrarse en el LAC.

Se imaginó una solución para encontrar una manera de asimilar cuenta la posibilidad de algunas interacciones, en el formulación de expansión de clústeres, para ser más importante que otros. Por supuesto, no hay forma de identificar estos interacciones sobre la marcha durante el proceso de optimización, por lo que se decidió diseñar un dispositivo inteligente basado en GA sistema, representado, para identificar el Interacciones relevantes de muchos cuerpos de un problema dado y para obtener el ajuste de los coeficientes para estos interacciones.

Los individuos de la población GA representan diferentes formas de construir una expansión de clúster o diferentes interacciones corporales a considerar. Una población de diferentes plantillas, o posibles expansiones de clústeres, se crea en la primera generación. Un conjunto de formación que consta de locales Las configuraciones atómicas se presentan a cada individuo. (conjunto de formación 1), y estas configuraciones se "traducen" a una expansión de clúster de acuerdo con el esquema de este individual. Un algoritmo SVD encuentra el apropiado coeficientes, minimizando el error de mínimos cuadrados en el conjunto de entrenamiento 1. Con los coeficientes ajustados, un segundo conjunto de entrenamiento (conjunto de entrenamiento 2) se traduce como el grupo expansión propuesta por el individuo, el mínimo cuadrado El error se calcula y se utiliza como medida de cuán bueno este individuo, o este conjunto particular de muchos cuerpos interacciones, es capaz de producir una buena predicción. Como el El algoritmo genético evoluciona, solo los individuos que representar expansiones adecuadas sobrevivirían.

Los resultados obtenidos con el problema FeCuVac1nn son se muestra. El rendimiento de la GA basado modelo es sorprendentemente bueno en comparación con el preliminar resultados que obtuvimos con el modelo tradicional.

La herramienta de aproximación de expansión de clústeres se ha aplicado con éxito a la predicción VME simple problemas. Se ha diseñado un modelo basado en GA para determinar las interacciones más importantes que se deben tomar en cuenta, permitiendo el número de términos en el la expansión será limitada.

Sin embargo, el potencial de la expansión del clúster parece limitada debido a la alta complejidad que el El problema de optimización toma cuando el número de atómicos se incrementan los sitios a considerar. Por ejemplo, el consideración de los problemas 2nn (21 sitios en ALC) requiere la determinación de alrededor de 10,000 parámetros si las interacciones de triplete se introducen en el expansión. Un problema de optimización de este tamaño es conocido en terminología GA como parámetro grande Problema de optimización (LPOP) y requiere una gran tamaño de la población y muchas generaciones para converger. los La complejidad computacional, por lo tanto, explota rápidamente. Por ello y considerando que, al mismo tiempo, obtuvimos mejores resultados con un híbrido difuso - marco de red neuronal (consulte las siguientes secciones), se decidió abandonar este modelo en favor de un modelo más enfoque eficiente y robusto.

La Inteligencia Artificial (IA) es la combinación de algoritmos, datos y software utilizados para desarrollar computadoras sistemas de los que se puede decir que son inteligentes. Aquí el La característica definitoria de la inteligencia es la capacidad de aprender de experiencias pasadas y resolver problemas cuando falta información importante, para poder manejar situaciones complejas y reaccionar correctamente a nuevos. Hay muchos sistemas computacionales modelos que se consideran ramas de lo artificial campo de inteligencia, cada uno adecuado para un tipo diferente de problema. Para nuestra aplicación particular, los feedforwards La red neuronal artificial (ANN) es particularmente bien adaptado, ya que proporciona un general marco para representar funcional no lineal mapeos entre un conjunto de variables de entrada y un conjunto de funciones de salida 25. Es un aproximador universal en el sentir que un perceptrón multicapa (MLP) puede aproximar cualquier función multivariante continua a cualquier grado deseado de precisión, siempre que un un número suficientemente grande de neuronas ocultas son disponible.

La figura 10 muestra las cualidades de predicción de ANN para binario. y problemas ternarios 3nn. El error medio cometido es 0.51% para FeCu3nn y 3.37% para FeCuVac3nn (con máximo 7 vacantes en ALC). La correlación el coeficiente r^2 es mayor que 0,99 en ambos casos. La ANN está superando claramente la expansión del clúster, no solo porque el error cometido es mucho menor, pero también porque el procedimiento de entrenamiento es mucho menor demandante de tiempo computacional.

Las siguientes secciones presentan los experimentos que hicimos para estudiar diferentes arquitecturas ANN y formación algoritmos.

Se han considerado dos arquitecturas MLP. El primero es la capa clásica mono-oculta completamente interconectada red sin conexiones de bypass, utilizando funciones de activación sigmoidea, como se describe ampliamente por muchos otros. Se indicará como fijo Arquitectura MLP (FAMLP) a partir de ahora. El segundo es la red de correlación en cascada de Fahlman-Lebiere (CNN) como se describe en la Ref. 28. Es, contrariamente a la FAMLP, un algoritmo constructivo donde las unidades ocultas se agregan en capas sucesivas.

Se han considerado dos algoritmos para la FAMLP formación. El primero es el Resilient de descenso más empinado Propagación (RPROP) utilizada en modo por lotes, como se describe. El segundo es el Levenberg-Marquardt (LM),

descrito por ejemplo, que es un aproximación del método de Newton de segundo orden y que no requiere el cálculo de la hessiana matriz. Las conexiones sinápticas se inicializaron en aleatorio entre $\pm 2.4 / F$ (F es el nodo fan-inn26 como recomendado).

El algoritmo de entrenamiento CCN se cambió en comparación con el original de Fahlman-Lebiere. En lugar de proceder a la adición de un nuevo nodo oculto en dos fases, todas las sinapsis vinculadas a ella se entrenan todas junto con el de salida, con un algoritmo de entrenamiento clásico (elegido ser LM). La razón es que nos parece que el El esquema de entrenamiento original de Fahlman-Lebiere es el más adecuado para problemas de clasificación usando la codificación 1-of-c para la señal de salida. Además, QuickProp30 algoritmo propuesto originalmente para el entrenamiento CCN28 no dar resultados más satisfactorios que RPROP y LM y por lo tanto, no se considera en el presente documento. 20 los nodos candidatos se consideraron antes que cualquier nuevo adición de unidad oculta. La estrategia de inicialización de sinapsis fue el mismo que para el entrenamiento FAMPLP, y la activación funciones fueron elegidas al azar entre el sigmoide, Tangente gaussiana e hiperbólica.

Todas las arquitecturas y algoritmos de entrenamiento han sido probado en los problemas de FeCu1nn y FeCu2nn. los FAMPLP se entrenó con varios números de nodos. Los experimentos se realizaron 20 veces.

La muestra los experimentos para FeCu2nn problema. La resume los resultados para ambos FeCu1nn y los problemas de FeCu2nn. El seguimiento se pueden hacer observaciones:

- El número más adecuado de nodos ocultos para el FAMPLP no es fácil de determinar, debido a la variación sustancial del MRE final. De hecho, es absolutamente necesario para ejecutar todos los experimentos varios veces, lo cual es una mala noticia de la computacional punto de vista.

- Para FAMPLP, el algoritmo RPROP no alcanza tan bajo MRE como LM, excepto si el conjunto de entrenamiento es lo suficientemente grande. Por tanto, LM es siempre preferible.

- La variación final de MRE es sorprendentemente menor para CCN que FAMPLP.

- La arquitectura CCN en general no es capaz de alcanzando el mismo MRE que la FAMPLP, a pesar de su ventaja para construir la red automáticamente. Las arquitecturas en profundidad son, por tanto, aparentemente menos apropiado para el problema de correlación VME que el uso de una sola capa oculta.

Por tanto, está claro que alcanzar un MRE razonablemente bajo es bastante fácil, mientras que el ajuste fino no es concebible sin una gran cantidad de experimentos de entrenamiento.

La muestra los experimentos realizados con el 3nn problemas. Solo se probó la arquitectura de CNN. Los experimentos se realizaron 20 veces.

La comparación muestra claramente que la ANN necesita en ejemplos de entrenamiento para converger a la MRE más baja posible se comporta bien con el problema complejidad. El cambio de 1nn a 2nn o 3nn no hizo que este número explotara. La misma observación vale para la comparación de los problemas de FeVac y FeCuVac al de FeCu. Este es un punto muy importante con respecto a la extensión de la metodología a más complejos problemas.

La ANN es claramente una herramienta muy prometedora para el VME regresión versus ALC. Errores residuales medios bajos de predicciones y muy buenos coeficientes de correlación son de hecho, se obtiene muy fácilmente. Sin embargo, el ajuste fino de ANN no es un tema fcil, porque en la prtctica se necesitan bastantes experimentos de entrenamiento antes de se puede alcanzar el posible rendimiento de la ANN.

En consecuencia, nos parece que la formación CCN esquema es un buen punto de partida para hacer el primer NN ensayos de entrenamiento sobre un nuevo problema, con el fin de determinar el número de puntos de entrenamiento necesarios para alcanzar el MRE más baja posible. Luego una larga serie de FAMPLP entrenamientos, con el algoritmo LM aplicado en diferentes arquitecturas de red, se realizarán como un segundo paso para un ajuste fino.

Como ya se mencionó, un sistema Fuzzy Logic31 (FL) tiene ha sido diseñado para evaluar la incertidumbre32 inherente a la uso de la RNA y evaluar el "riesgo" 33 asociado con su uso en lugar del cálculo completo, de modo que sea capaz de construir un sistema integrado, capaz de retroalimentación. La muestra un ejemplo de ANN capacitado para el Problema de FeCu1nn y evaluación de riesgos asociados esquema. A pesar del MRE razonablemente bajo, el error cometidos para algunos casos puede ser bastante grande, hasta 17,5% para este ejemplo en particular. El objetivo

de la FL sería entonces identificar, sobre la base tanto de la LAC y el VME predicho correspondiente, ya sea el error de correlación es probablemente mayor que un cierto Umbral de rechazo de errores (ERT).

El sistema FL que desarrollamos sigue un modelo de Sugeno³⁴⁻³⁵ y produce una salida que es 0 o 1, que significa respectivamente "aceptación" o "rechazo" de la ANN predijo VME. Las entradas FL son varias información extraída del LAC. Por ejemplo, el Las variables para el problema FeCuInn fueron:

- El número total !NCu de átomos de cobre en LAC.
- La diferencia !CCubentre el número de Cu átomos que son Inn del átomo saltarán y el número de átomos de Cu que son Inn del salto vacante.
- La predicción de ANN !Em * de la energía de migración. Los conjuntos de forma triangular se utilizan para la parte de fuzzificación del modelo Sugeno.

Un aprendizaje basado en algoritmos genéticos (GA) automatizados El esquema ha sido desarrollado para generar el FL definición del sistema sobre la base del VME completo disponible base de datos. Las variables de optimización de GA son las centrales coordenadas de los conjuntos triangulares en las entradas FL, como se muestra. Las conclusiones de las reglas son determinado después de un pasaje en la base de datos de VME. Estoy gordo al menos un punto que tiene un error inaceptable cumple un cierta regla, su conclusión se elige automáticamente para ser 1 ("rechazo"). La conclusión es 0 ("aceptación") de otra manera.

Por tanto, la tarea de GA es seleccionar los conjuntos difusos como apropiadamente como sea posible, para aislar en qué condiciones ¿Precisamente la ANN está fallando en producir un buen VME? predicción.

El esquema clásico de inferencia de Sugeno ha sido modificado para mejorar el rendimiento de FL.

Por ejemplo, En la figura 15, la conclusión Cr de todas las reglas que involucran el número 3 de la entrada FL considerada es "rechazo". Solo una observación lleva a esa conclusión, pero fue muy cerca del pico establecido. En ese caso, el La conclusión de "rechazo" de la regla r se puede utilizar con un alto grado de confianza, por lo que !Tr = μ_a está muy cerca de 1. Por otro lado, la conclusión de todas las reglas r * que involucran al conjunto número 2 también son "rechazo", pero con un nivel de confianza mucho menor. En este caso, !Tr * = μ_c está cerca de 0. La regla r * tiene, en consecuencia, menos Posibilidades de inducir rechazos incorrectos de VME aceptable. predicciones.

La complejidad de la función objetivo de GA es bastante grande. Dos pasajes en la base de datos general de VME son de hecho requerido: el primero sirve para determinar las reglas " conclusiones (como se muestra en la figura 15) y la segunda sirve para calcular la función f. La aplicación de tal método consume mucho tiempo si la base de datos es grande, que es el caso en la práctica de 2nn y 3nn problemas. Para reducir esa complejidad, tenemos introdujo una operación de agrupamiento en el aprendizaje FL datos, representados en la figura 16. Puntos que tienen un Se eliminan el valor de todas las entradas FL, siempre que estén en el mismo lado de la ERT. Solo queda un punto, y se le asigna un factor de peso que corresponde a la número de puntos eliminados más uno. Este factor es entonces tomado en cuenta cuando los miembros R1 y R2 de la f se calculan las funciones. En la práctica, los puntos por encima del ERT no están agrupados (es asequible ya que no están muy numerosos) y la operación de agrupamiento es muy rápida gracias a la ayuda de un árbol binario. El tamaño del FL tabla de aprendizaje se reduce a su vez tremendamente y la En consecuencia, la optimización de GA es mucho más rápida. Un elección adecuada de las tolerancias de selección mostradas en La permite realizar el efecto de agrupamiento insignificante en las capacidades reales de FL para aislar el predicciones ANN inaceptables.

La última característica indefinida del sistema FL es la selección adecuada del ERT. De hecho, podemos verlo. como un compromiso entre la precisión ANN y AKMC velocidad. La ERT en realidad no se elige a priori, sino más bien determinado lo más bajo posible con la restricción para mantener R1 razonablemente limitado, como se muestra. En consecuencia, la elección de un ERT grande es menos rigurosa en la evaluación de riesgos de la ANN pero convoca a MD cálculos con menos frecuencia y al revés.

La muestra los resultados del recocido térmico. experimentos calculados con una pequeña caja AKMC que contiene 1,4% de Cu y 1 vacante única. El VME se correlacionó con un MLP que tenía un MRE de 0,5%. No Se aplicó la evaluación de riesgos FL. Satisfactorio Las predicciones del límite de solubilidad del Cu en Fe fueron obtenido a diferentes temperaturas.

4.Conclusión

En este trabajo, hemos informado sobre nuestro esfuerzo para Desarrollar una herramienta de regresión para reemplazar parcialmente un costoso Cálculo de "dinámica molecular" de la configuración atómica local. vacante dependiente migración energía en un esquema de Monte Carlo cinético atomístico, donde el La configuración atómica local se presenta bajo la forma de una matriz de decenas de enteros categóricos. Tenemos en el primer lugar contemplaba un enfoque de expansión de clústeres. Sin embargo, este último ha sido abandonado por un red neuronal, que ha demostrado ser más robusta, bien educado y prometedor para futuros desarrollos de el proyecto.

Nuestro objetivo futuro es continuar la aplicación de este método a situaciones más complicadas. Primero el número de sitios atómicos tomados en consideración debe ser aumentado para una mejor descripción de la física, y se incluirán más especies químicas en el modelo. En segundo lugar, para abordar los problemas de irradiación, el El modelo de Monte Carlo cinético atomístico debe ser capaz de considerar la migración de otro tipo de defecto puntual, es decir, el autointersticial. Es un evento mas complicado que la migración de vacantes, principalmente debido a la mayor campo de tensión extendido y anisotrópico que para una vacante, que potencia y complica su interacción con átomos vecinos.

Por tanto, nuestro trabajo futuro tendrá que afrontar no sólo un mayor número de variables de entrada de la red neuronal artificial, pero también un mapeo más complicado entre estas entradas y las energías de migración de defectos puntuales que tienen que ser predicho.

Referencias

- [1] Hassan, M.R., Mamun, A.A., Hossain, M.I., Arifuzzaman, M. "Moisture damage modeling in lime and chemically modified asphalt at nanolevel using ensemble computational intelligence", (2018) *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2018, art. no. 7525789.
- [2] Fister, I. "Computational intelligence algorithms for the development of an artificial sport trainer", (2017) *Informatica (Slovenia)*, 41 (4), pp. 517-518.
- [3] Khalid, M.H., Tuszyński, P.K., Kazemi, P., Szlek, J., Jachowicz, R., Mendyk, A. "Transparent computational intelligence models for pharmaceutical tableting process", (2016) *Complex Adaptive Systems Modeling*, 4 (1), art. no. 7.
- [4] Taghezout, N., Houari, N.S., Nador, A. "Negotiation model for knowledge management system using computational collective intelligence and ontology-based reasoning: Case study of SONATRACH AVAL", (2016) *International Journal of Simulation and Process Modelling*, 11 (5), pp. 403-427.
- [5] Hassan, Md.R. "Modeling of moisture damage in carbon nano tube modified asphalt using hybrid of artificial neural network and other computational intelligence approaches", (2015) *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 12 (11), pp. 4927-4934.
- [6] Rzecki, K., Pławiak, P., Niedźwiecki, M., Sośnicki, T., Leśkow, J., Ciesielski, M. "Person recognition based on touch screen gestures using computational intelligence methods", (2017) *Information Sciences*, 415-416, pp. 70-84.
- [7] Perova, I., Pliss, I. "Deep hybrid system of computational intelligence with architecture adaptation for medical fuzzy diagnostics", (2017) *International Journal of Intelligent Systems and Applications*, 9 (7), pp. 12-21.
- [8] Çakır, M., Akbulut, A., Hatay Önen, Y. "Analysis of the use of computational intelligence techniques for air-conditioning systems: A systematic mapping study", (2019) *Measurement and Control (United Kingdom)*, 52 (7-8), pp. 1084-1094.
- [9] Javdanian, H., Lee, S. "Evaluating unconfined compressive strength of cohesive soils stabilized with geopolymer: a computational intelligence approach", (2019) *Engineering with Computers*, 35 (1), pp. 191-199.
- [10] Bakar, A.I.A., Zamani, M.K.M., Musirin, I., Ghani, N.A.M. "Load management for voltage control study using parallel immunized-computational intelligence technique", (2018) *Bulletin of Electrical Engineering and Informatics*, 7 (2), pp. 176-182.
- [11] Hanus, R., Zych, M., Kusy, M., Jaszczur, M., Petryka, L. "Identification of liquid-gas flow regime in a pipeline using gamma-ray absorption technique and computational intelligence methods", (2018) *Flow Measurement and Instrumentation*, 60, pp. 17-23.
- [12] Pichl, L., Kaizoji, T. "Computational intelligence methods for data mining of causality extent in the time series", (2018) *International Journal of Computational Science and Engineering*, 16 (4), pp. 411-418.

- [13] Kashkaria, B.S.H., Syam, M.I. “Evolutionary computational intelligence in solving a class of nonlinear Volterra–Fredholm integro-differential equations”, (2017) *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 311, pp. 314-323.
- [14] Halim, Z., Baig, A.R., Abbas, G., Islam, M.A. “Computational intelligence-based search of entertaining rules in the space of predator/prey games”, (2017) *Journal of Multiple-Valued Logic and Soft Computing*, 28 (6), pp. 643-663.
- [15] Abbas, A., Zhang, L., Khan, S.U. “A survey on context-aware recommender systems based on computational intelligence techniques”, (2015) *Computing*, 97 (7), pp. 667-690.
- [16] Owolabi, T.O., Akande, K.O., Olatunji, S.O. “Development and validation of surface energies estimator (SEE) using computational intelligence technique”, (2015) *Computational Materials Science*, 101, pp. 143-151.
- [17] Owolabi, T.O., Akande, K.O., Sunday, O.O. “Modeling of average surface energy estimator using computational intelligence technique”, (2015) *Multidiscipline Modeling in Materials and Structures*, 11 (2), pp. 284-296.
- [18] Raja, M.A.Z., Manzar, M.A., Samar, R. “An efficient computational intelligence approach for solving fractional order Riccati equations using ANN and SQP”, (2015) *Applied Mathematical Modelling*, 39 (10-11), pp. 3075-3093.