

# 神经网络辅助理论本构模型预测 高熵合金高温流动应力行为\*

姜健 胡涛 庄三少 冯森林\*\*

(上海交通大学船舶海洋与建筑工程学院工程力学系(海洋工程国家重点实验室),上海,200240)

**摘要** 本文建立了一套确定双曲正弦 Arrhenius 型方程系数的神经网络模型,选取了高熵合金不同高温和应变速率下的流动应力预测来验证模型. 首先采用  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  高熵合金进行检验,并与传统方法进行比较,结果表明,神经网络方法在高应变速率和低温条件下得到的系数能够更好地描述试验热流应力. 进一步采用均方根误差(RMSE)和相关系数(R)对模型结果和试验结果进行评估,神经网络方法在整体数据下的 RMSE 和 R 分别为 27.7 和 0.985,优于传统方法的 33.1 和 0.979. 最后,利用该神经网络模型研究了其他高熵合金,如  $(CoCrNi)_{94}Ti_3Al_3$ 、 $FeCrCuNi_2Mn_2$  和  $AlCrCuFeNi$  的热变形行为,神经网络预测结果与试验结果吻合好,表明该神经网络模型具有较好的普遍适用性.

**关键词** 高熵合金,高温变形,神经网络,本构方程

DOI:10.19636/j.cnki.cjasm42-1250/o3.2023.053

## 0 引言

Yeh<sup>[1]</sup>和 Cantor<sup>[2]</sup>于 2004 年将包含 5 种或以上原子比例相等或接近相等的主元元素组成的合金定义为高熵合金(HEAs). 相较于传统合金,高熵合金具有高强度<sup>[3]</sup>、高硬度<sup>[4]</sup>、高温稳定性<sup>[5]</sup>和耐腐蚀<sup>[6,7]</sup>等优异性能. 因此,高熵合金在科学研究及工业应用领域受到了广泛关注<sup>[8]</sup>.

金属材料在再结晶温度以上的塑性变形被称作热变形. 在金属材料成型过程中,热变形可以有效地细化晶粒,从而提高母材的屈服强度和抗拉强度等力学性能<sup>[9,10]</sup>. 因此,有必要研究金属材料在高温下的变形行为,尤其是高温变形过程中流动应力的演化. 众多学者研究了高熵合金流动行为,并构建了一系列本构模型,主要包括 Zelili-Armstrong 模型<sup>[11]</sup>、Johnson-Cook 模型<sup>[12]</sup>和双曲正弦 Arrhenius 模型<sup>[13]</sup>等. Brown<sup>[14]</sup>研究了  $CoCrFeMnNi$  合金应变速率为  $0.01\sim 1\text{ s}^{-1}$ ,温度为  $200\sim 800^\circ\text{C}$  的热压缩行

为,采用上述的本构模型分别进行应力预测,结果表明,在高温条件下,双曲正弦 Arrhenius 模型的预测效果最理想. Patnamsetty<sup>[15]</sup>采用双曲正弦 Arrhenius 模型研究了  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  在  $1023\sim 1423\text{ K}$  温度范围和  $10^{-3}\sim 10\text{ s}^{-1}$  应变速率范围内的流动应力,结果表明该模型能较好地描述材料在实验条件下的热变形行为,但在高应变速率和低温条件下,预测应力与试验应力存在较大差异.

近年来,随着计算机技术的普及和发展,机器学习方法在科学研究领域得到了广泛的应用,其中人工神经网络是得到广泛应用的模型之一. 人工神经网络可以通过机器学习大量的试验数据来建立或优化的材料本构模型,已经被用于复合材料本构建模<sup>[16]</sup>和金属材料的 J2 塑性本构优化<sup>[17]</sup>等. 人工神经网络模型也被直接用于预测流动应力<sup>[18,19]</sup>,通过输入应变、温度和应变速率直接输出流动应力,结果较为准确,但神经网络的泛化能力尚未得到充分的讨论和认可.

\* 国家自然科学基金项目(U2067220,52371284)和中国核工业集团领创科研项目资助.

2023-10-25 收到修改稿, 2023-10-27 网络首发.

\*\* 通讯作者. E-mail: mlfeng@sjtu.edu.cn.

本文通过人工神经网络模型来确定双曲正弦 Arrhenius 型模型的相关系数,从而来计算材料的流动应力.通过一些公开的高熵合金热变形数据,预测了不同高温和应变速率下材料的流动应力,并将该模型得到的流动应力与传统计算系数方法得到的结果进行了比较,验证了模型的准确性和适用性.

## 1 方法

### 1.1 本构方程

双曲正弦 Arrhenius 模型是由 Sellars 和 McTegart<sup>[13]</sup>在 Zener 和 Hollomon<sup>[20]</sup>工作的基础上提出的一种半经验本构模型.该模型认为材料的流动应力( $\sigma$ )满足如下方程:

$$f(\sigma) = A [\sinh(\alpha\sigma)]^n = Z \quad (1)$$

其中  $A$  和  $n$  是材料常数. Zener-Hollomon 参数  $Z$  为温度补偿的应变率因子,可以表示为:

$$Z = \dot{\epsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right) \quad (2)$$

其中  $Q$  为热变形的表观活化能,  $\dot{\epsilon}$  为应变速率,  $R$  为通用气体常数.式(1)中  $\alpha$  为调节应力参数( $\text{MPa}^{-1}$ ),可以表示为,

$$\alpha = \frac{\beta}{n_1} \quad (3)$$

其中  $\beta$  和  $n_1$  为应力指数<sup>[20-22]</sup>.上式中的  $\beta$  和  $n_1$  可以通过下式确定:

$$Z = f(\sigma) = A_1 \sigma^{n_1} \quad (4)$$

$$Z = f(\sigma) = A_2 \exp(\beta\sigma) \quad (5)$$

方程(4)和(5)分别适用于低应力( $\alpha\sigma < 0.8$ )和高应力( $\alpha\sigma > 1.2$ )的材料流动应力计算.双曲正弦函数方程(1)不仅适用于低应力也适用于高应力,本文将采用双曲正弦函数来进行高熵合金材料的热变形行为研究.

为计算这些方程中的系数,传统的方法是将式(2)代入式(4)(5)后取对数将方程改写为:

$$\ln \dot{\epsilon} = n_1 \ln \sigma + \ln A_1 - \frac{Q}{RT} \quad (6)$$

$$\ln \dot{\epsilon} = \beta \sigma + \ln A_2 - \frac{Q}{RT} \quad (7)$$

由式(6)和(7)可知,分别线性拟合不同温度下的  $\ln \dot{\epsilon}$  和  $\ln \sigma$  以及  $\ln \dot{\epsilon}$  和  $\sigma$  可得到斜率  $n_1$  和  $\beta$  的值,然后

可以通过式(3)计算得到  $\alpha$ .进一步将式(2)代入式(1)取对数将方程改写为:

$$\ln \dot{\epsilon} + \frac{Q}{RT} = n \ln [\sinh(\alpha\sigma)] + \ln A \quad (8)$$

由上式可知,分别线性拟合不同温度下的  $\ln \dot{\epsilon}$  和  $\ln [\sinh(\alpha\sigma)]$  可得到式(8)中的斜率  $n$ ,在不同应变速率下线性拟合  $\ln [\sinh(\alpha\sigma)]$  和  $1/T$  可得到斜率  $Q/nR$ .最后直接对式(1)取对数将方程改写为:

$$\ln Z = n \ln [\sinh(\alpha\sigma)] + \ln A \quad (9)$$

根据式(9),通过线性拟合  $\ln Z$  和  $\ln [\sinh(\alpha\sigma)]$  可得到  $A$  的值.

通过上述步骤得到系数后,可由下式进行流动应力计算,该式由(1)和(2)式转换而来:

$$\sigma = \frac{1}{\alpha} \sinh^{-1} \left[ \left( \frac{\dot{\epsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT}\right)}{A} \right)^{1/n} \right] \quad (10)$$

### 1.2 人工神经网络

本文构建了一个具有两个隐藏层的全连接神经网络,用于确定双曲正弦 Arrhenius 型模型系数与应变之间的关系.所使用的神经网络示意图如图 1 所示,网络的输入为应变,输出为模型的系数,神经网络的隐藏层可以增加网络的复杂程度,考虑到传统方法常用四阶或以上多项式拟合系数与应变的关系,我们选择加入两层隐藏层,每层均含有 10 个神经元,激活函数选择 Elu 函数,优化器选择常用的 Adam 优化器.对于反向传播过程所需的损失函数,我们将神经网络输出的系数与温度及应变速率相结合,计算双曲正弦 Arrhenius 模型的应力,然后与实际应力进行比较,将模型得到的应力和实际应力的

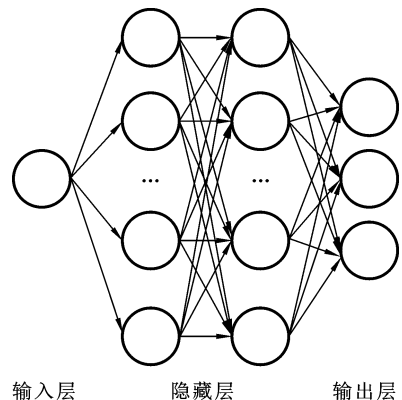


图 1 神经网络示意图

Fig. 1 The diagram of neural network

均方根误差 (RMSE) 作为损失函数. 整个过程如图 2 所示. 我们将使用三个结构相同的神经网络来完成我们的工作. 神经网络 1 和 2 分别根据式 (4) 和

(5) 预测  $n_1$  和  $\beta$ , 则  $\alpha$  可由式 (3) 确定. 网络 3 根据得到的  $\alpha$  和式 (1) 预测其他系数  $A$ 、 $Q$  和  $n$ .

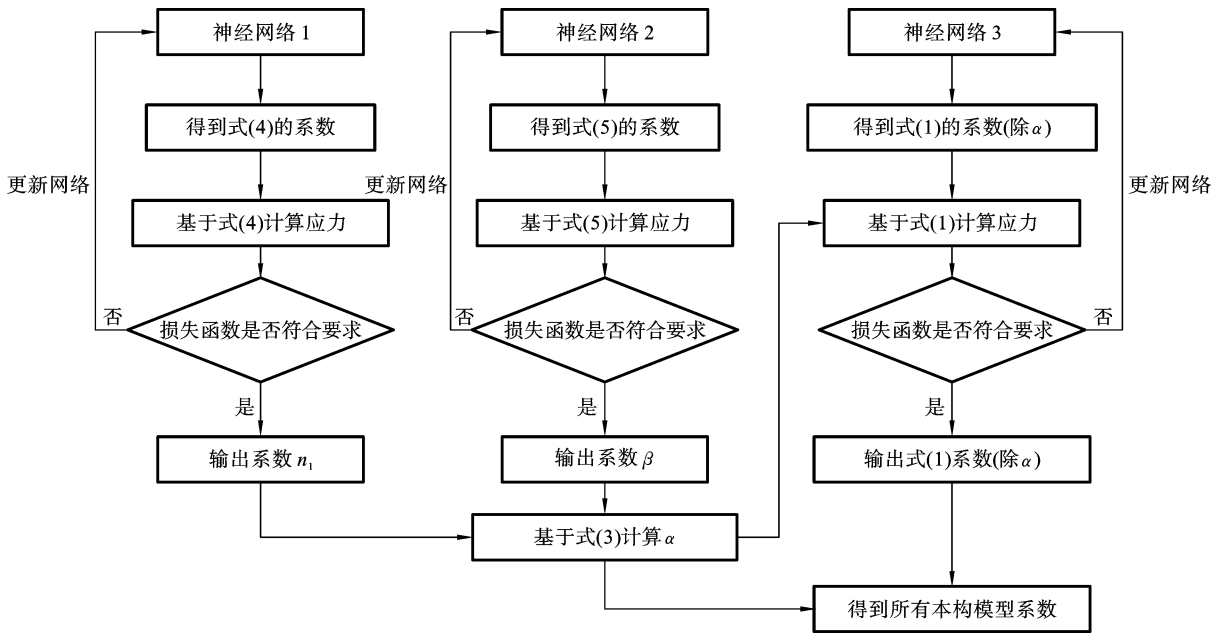


图 2 利用神经网络确定双曲正弦 Arrhenius 型模型系数

Fig. 2 The process of determining the coefficients of hyperbolic-sinusoidal Arrhenius type model by neural network

## 2 结果与讨论

### 2.1 双曲正弦 Arrhenius 型模型系数

为了验证我们的模型, 我们使用  $Al_{0.3}CoCrFe-Ni$  高熵合金在热变形下的应力-应变数据, 采用我们的方法计算本构模型的系数, 并与传统方法(平均斜率法)进行比较. 训练和验证的数据由图 4、图 5 中实线表示的试验曲线中取点得到. 训练集含有温度为 1023、1123、1173、1273、1323 和 1423 K 的试验曲线中的 1614 个数据点, 验证集含有温度为 1073、1223 和 1373 K 的试验曲线中的 869 个数据点, 验证集数据占总体数据的 35%.

采用神经网络方法和传统方法得到的  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  双曲正弦 Arrhenius 型模型系数如图 3 所示. 两种方法得到的系数数量级接近, 但具体数值存在差异, 这是由于传统方法在计算过程中存在误差造成的. 传统求系数方法需要计算拟合直线的平均斜率, 但获得这些拟合直线的数据点较少, 且在不

同温度或不同应变速率下斜率变化较大. Sajadi<sup>[23]</sup> 采用双曲正弦 Arrhenius 型模型预测了  $FeCrCu-Ni_2Mn_2$  的流动应力, 他们利用不同温度下四条拟合直线的斜率平均值计算  $\beta$  值时, 4 条斜率值分别为 0.067、0.10、0.028 和 0.019, 平均值为 0.054. 可以看出, 原始斜率值相差很大, 平均值确定系数是一种粗略的近似方法. 神经网络选择系数计算的应力与试验应力的差值作为损失函数, 参数训练以损失最小为目标, 使系数结果能更好地描述试验应力(见 3.2 节). 利用我们建立的神经网络来计算系数是简单高效的, 对应力-应变关系及其对应的温度和应变速率进行训练后, 可以直接给出系数与应变的关系来描述流动应力.

### 2.2 流动应力预测

将神经网络得到的系数代入双曲正弦 Arrhenius 型模型中, 即可计算出预测应力. 利用 3.1 节中得到的系数进行应力计算, 并对神经网络方法和传统方法得到的结果进行分析.

图 4 和图 5 为应力-应变预测结果(虚线)与试

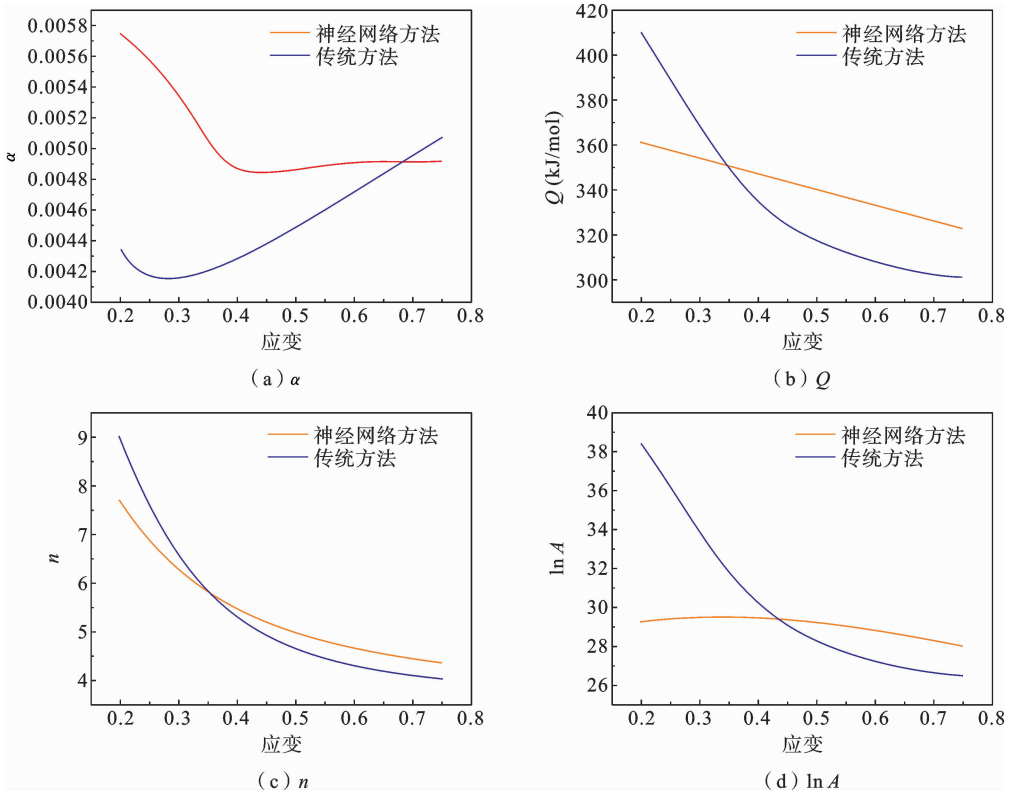


图 3 利用神经网络方法和传统方法得到双曲正弦 Arrhenius 型模型的系数

Fig. 3 The coefficients of hyperbolic-sinusoidal Arrhenius-type model obtained by neural network method and traditional method

验结果(实线)的对比,其中(a1)-(i1)为传统方法预测的结果,(a2)-(i2)为神经网络方法预测结果.从图 4 可以看出,神经网络方法得到的应力-应变曲线更接近试验的应力-应变曲线.传统方法对高应变速率( $10\text{ s}^{-1}$ )下的流动应力预测偏差较大,特别是在 1023-1123 K 较低温度区域.从图 5 可以看出,在没有神经网络训练的温度下,预测的应力-应变曲线与试验应力-应变曲线吻合较好,预测曲线甚至优于传统方法得到的曲线,尤其是在低温下(图 5(g1)-(g2)).结果表明,神经网络辅助的双曲正弦 Arrhenius 型模型能够很好地描述未训练温度下的热流动应力,具有较好的泛化能力.两种方法的试验应力与预测应力的关系如图 6 所示.可以看出,机器学习方法得到的结果明显更接近最佳拟合曲线,特别是在大于 500 MPa 的高应力下.神经网络训练过程的损失曲线如图 7 所示,其中第一、二、三个神经网络分别对应方程(4)的幂指数型本构、方程(5)的指数型本构和方程(1)的双曲正弦型本构模型.可以看出三

个神经网络模型的损失曲线随着训练过程趋向稳定,其中双曲正弦型模型的表现最好.

采用均方根误差(RMSE)和相关系数(R)来评价预测值与试验值之间的差异程度,其定义如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_i - P_i)^2} \quad (11)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})^2 \sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2}} \quad (12)$$

式中, $E$  为试验流动应力, $P$  为预测的流动应力, $N$  为选取的数据量, $\bar{E}$  和  $\bar{P}$  分别为  $E$  和  $P$  的平均值.

表 1 给出了传统方法和神经网络方法预测的应力结果的 RMSE 和 R 值.神经网络方法在总数据集下的 RMSE 和 R 分别为 27.7 和 0.985,优于传统方法的 33.1 和 0.979,这表明通过神经网络方法得到的系数能够较好地描述试验应力-应变关系.验证数据的 RMSE 和 R 分别为 28.9 和 0.985,反映了神经网络辅助模型的泛化能力和准确性.

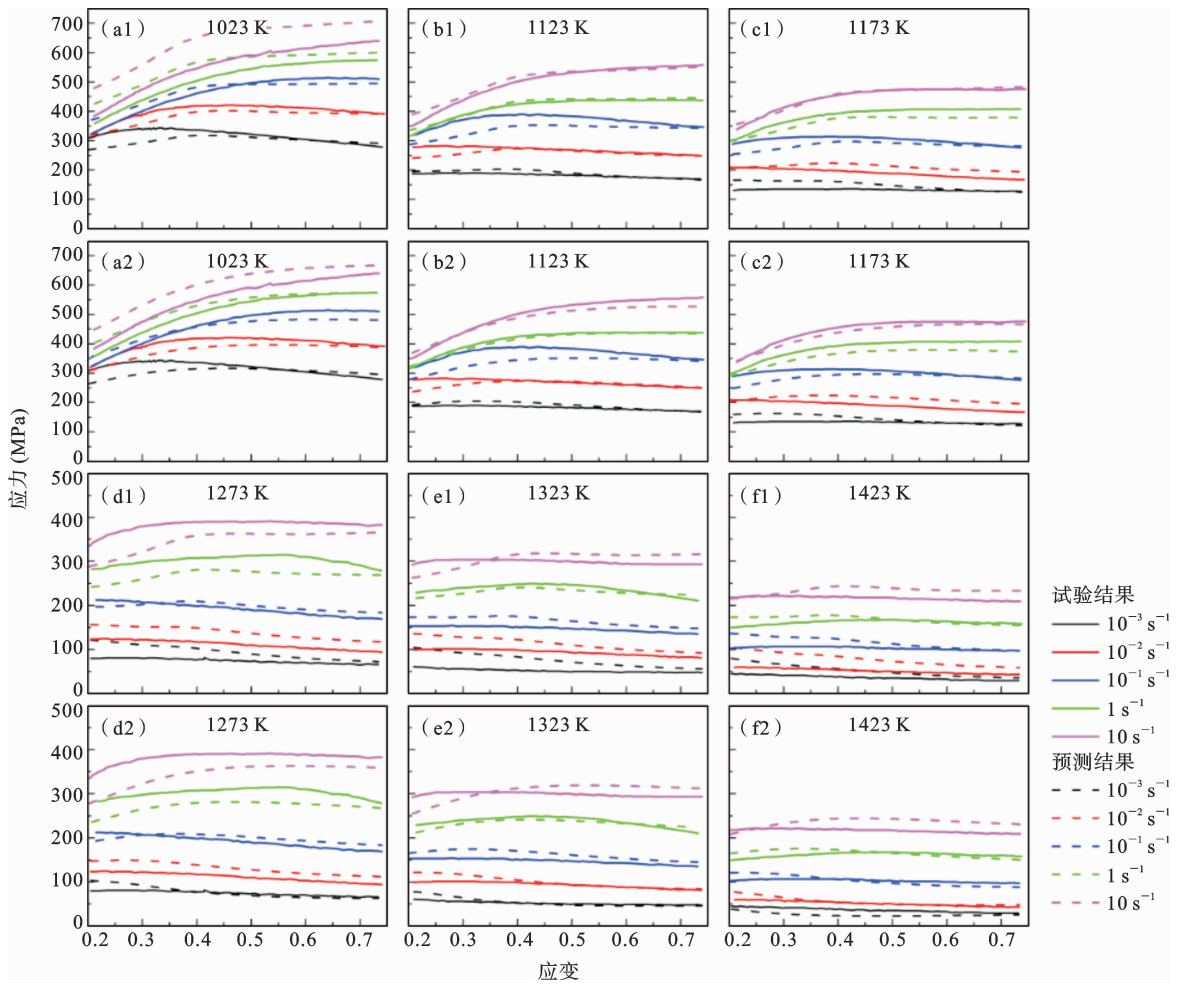


图 4  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  高熵合金在不同温度下的应力-应变和相应的预测结果:(a1)-(f1)传统方法,(a2)-(f2)神经网络方法  
 Fig. 4 Predicted flow stress curves of hyperbolic-sinusoidal Arrhenius-type model vs. experimental true stress-strain curves for  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  at these temperatures where neural network training: (a1)-(f1) traditional method, (a2)-(f2) neural network method

表 1 神经网络方法和传统方法应力预测结果与试验值的 RMSE 和 R

Table 1 RMSE and R calculated by neural network method and traditional method

方法	RMSE			R		
	训练集	验证集	总数据	训练集	验证集	总数据
神经网络方法	27.1	28.9	27.7	0.985	0.985	0.985
传统方法(平均斜率法)	—	—	33.1	—	—	0.979

从上述结果分析可以发现,对神经网络进行训练,得到理论模型的系数,神经网络在这里只是一个可以优化的函数生成器.如果撇开本构理论模型,而直接使用神经网络输出流动应力,则需要对训练好的神经网络的适用条件和泛化能力进行充分验证,

避免神经网络通常对结果的过拟合,难以保证其在未知区域的预测效果.本文采用的神经网络辅助本构理论模型,克服了直接使用神经网络预测流动应力的过拟合缺陷,其结果的泛化能力由理论模型决定.

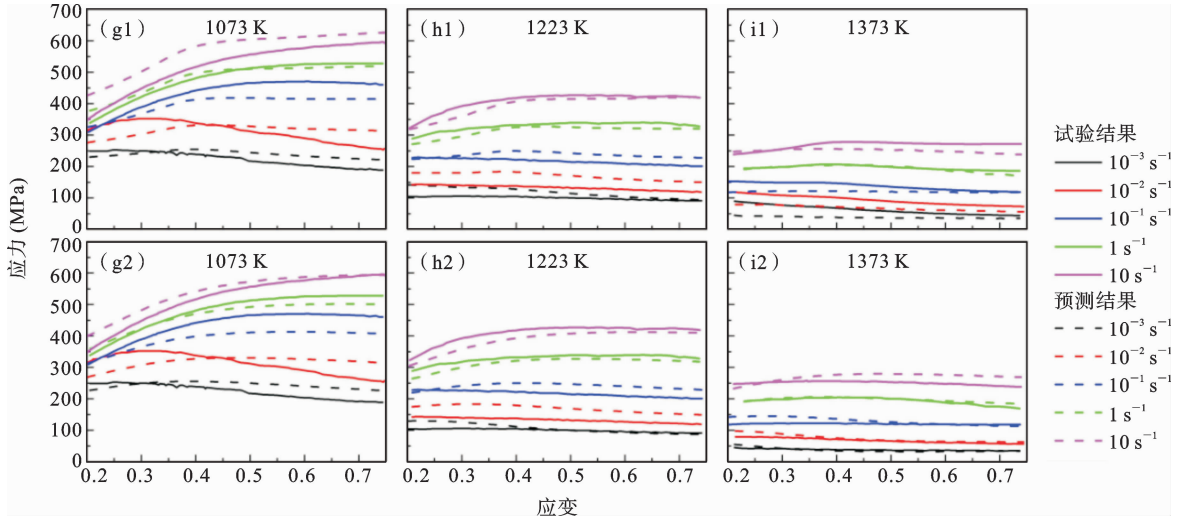


图 5  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  高熵合金在不同温度下的应力-应变和相应的预测结果:(g1)-(i1)传统方法,(g2)-(i2)神经网络方法  
 Fig. 5 Predicted flow stress curves of hyperbolic-sinusoidal Arrhenius type model vs. experimental true stress-strain curves for  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  at these temperatures where neural network verifying: (g1)-(i1) traditional method, (g2)-(i2) neural network method

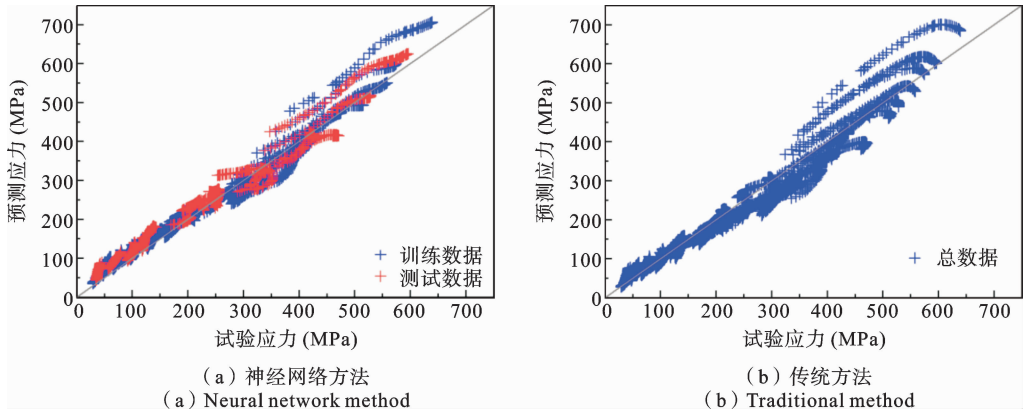


图 6  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  的预测流变应力与试验应力对比:(a)神经网络方法,(b)传统方法

Fig. 6 Predicted flow stress vs. experimental stress for  $Al_{0.3}CoCrFeNi$ : (a) neural network method, (b) traditional method

### 2.3 模型的普遍适用性

对于任意给定的高熵合金热变形数据,我们建立的模型应该能够直接对模型的系数进行分析,而不需要调整神经网络的超参数.为了表明该模型的普遍适用性,我们采用该模型分析了  $(CoCrNi)_{94}Ti_3Al_3$ <sup>[8]</sup>、 $FeCrCuNi_2Mn_2$ <sup>[23]</sup> 和  $AlCrCuFeNi$ <sup>[24]</sup> 的热变形行为,预测应力与试验应力的关系如图 8 所示.图 9,图 10,图 11 分别展示了在不同温度、应变率的应力应变曲线和相应的神经网络预测结果.

这三种合金数据中包含的温度和应变率均比上节采用的  $Al_{0.3}CoCrFeNi$  高熵合金数据少.但模型在预测应力方面的表现仍然良好,其与试验结果的 RMSE 值分别为 12.4、19.9 和 10.0,与试验数据吻合较好.预测结果和试验数据的最小二乘拟合 R 分别为 0.982、0.97 和 0.98,表明预测的流动应力与试验数据具有较好的相关性.结果表明,神经网络辅助模型满足描述不同合金热变形行为的要求.

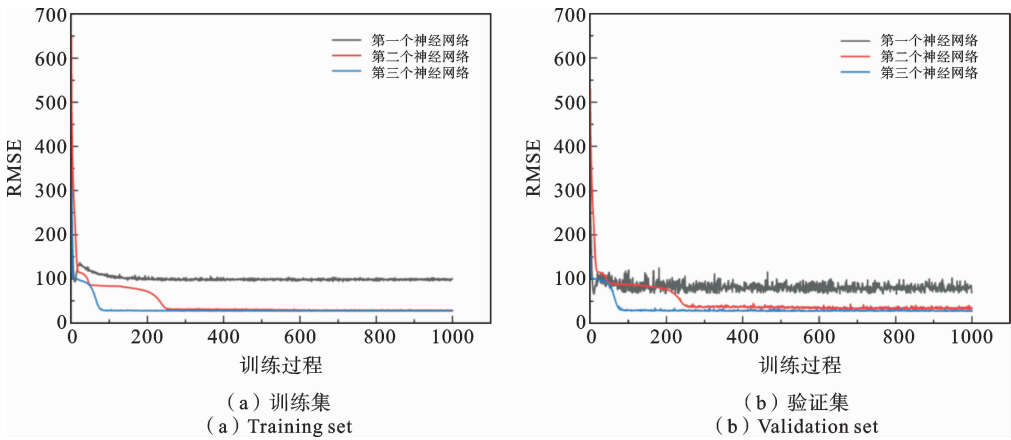


图 7 神经网络训练过程损失曲线:(a)训练集,(b)验证集

Fig. 7 Loss curve of neural network training process: (a) training set, (b) validation set

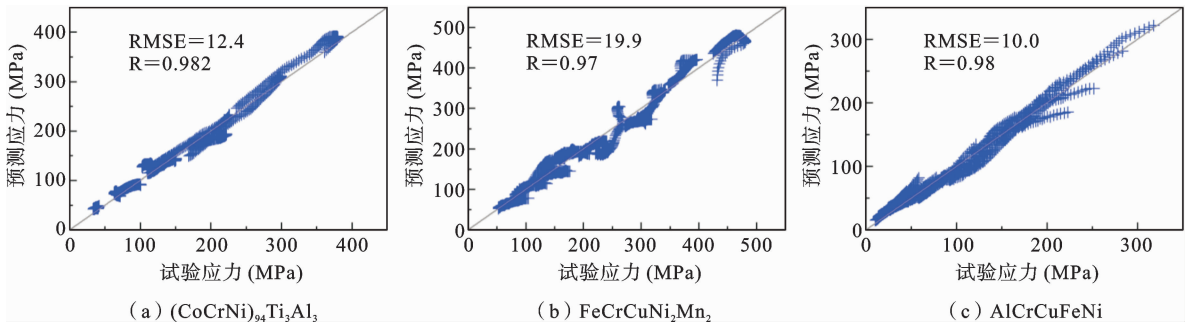


图 8 神经网络方法得到的预测应力与试验应力关系

Fig. 8 Predicted flow stress vs. experimental stress

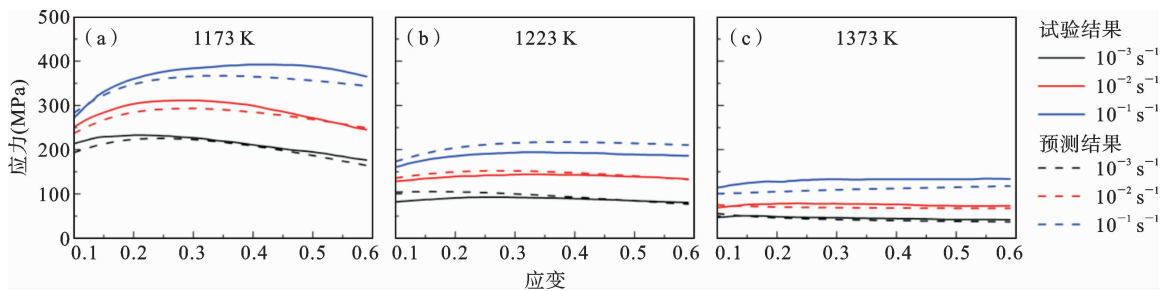


图 9 (CoCrNi)<sub>94</sub>Ti<sub>3</sub>Al<sub>3</sub> 在不同温度下的应力-应变和相应的预测结果

Fig. 9 Predicted flow stress-strain curves vs. experimental true stress-strain curves for (CoCrNi)<sub>94</sub>Ti<sub>3</sub>Al<sub>3</sub> at these temperatures

### 3 结论

本文建立了神经网络辅助双曲正弦 Arrhenius 型模型来确定高熵合金在高温下的流动应力. 主要结论如下:

- (1) 神经网络辅助双曲正弦 Arrhenius 型模型能较好地模拟试验流动应力, 特别是在高应变速率及低温条件下. 神经网络方法对总数据的 RMSE 和 R 分别为 27.7 和 0.985, 优于传统方法的 33.1 和 0.979.
- (2) 神经网络辅助双曲正弦 Arrhenius 型模型

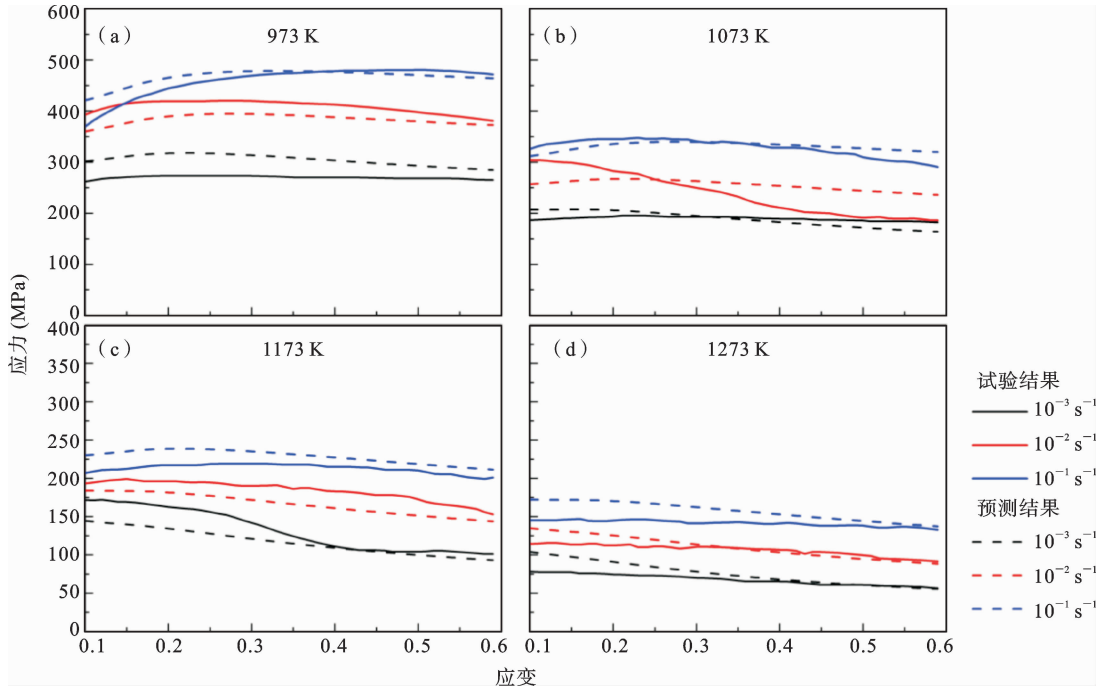


图 10 FeCrCuNi<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub> 在不同温度下的应力-应变和相应的预测结果

Fig.10 Predicted flow stress-strain curves vs. experimental true stress-strain curves for FeCrCuNi<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub> at these temperatures

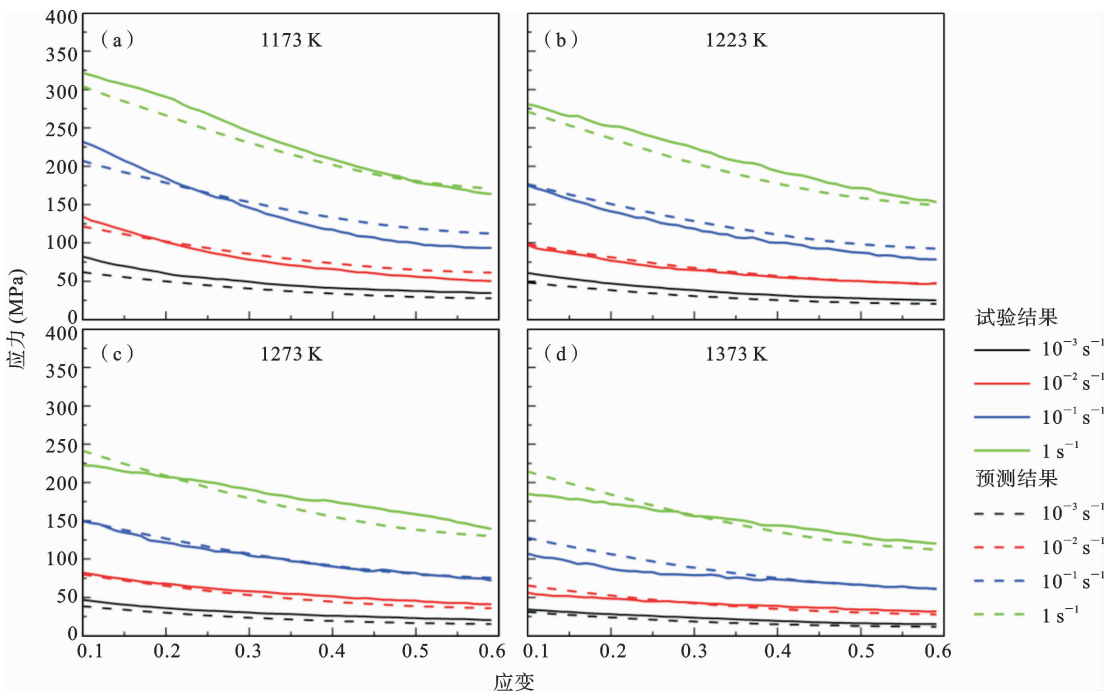


图 11 AlCrCuFeNi 在不同温度下的应力-应变和相应的预测结果

Fig.11 Predicted flow stress-strain curves vs. experimental true stress-strain curves for AlCrCuFeNi at these temperatures

得到的系数能够较好地预测未训练温度下的应力,验证集的 RMSE 和 R 分别为 28.9 和 0.985,表明该方法具有较好的泛化能力。

(3) 神经网络辅助双曲正弦 Arrhenius 型模型具有良好的普遍适用性,分析得到 (CoCrNi)<sub>94</sub>Ti<sub>3</sub>Al<sub>3</sub>、FeCrCuNi<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub> 和 AlCrCuFeNi 的 R 值分别为 0.982、0.97 和 0.98。

### 参考文献

- [1] Yeh J W, Chen S K, Lin S J, Gan J Y, Chin T S, Shun T T, Tsau C H, Chang S Y. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes [J]. *Advanced Engineering Materials*, 2004, 6(5): 299-303.
- [2] Cantor B, Chang I T H, Knight P, Vincent A J B. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 375-377: 213-218.
- [3] Senkov O N, Scott J M, Senkova S V, Meisenkothen F, Miracle D B, Woodward C F. Microstructure and elevated temperature properties of a refractory TaNb-HfZrTi alloy [J]. *Journal of Materials Science*, 2012, 47(9): 4062-4074.
- [4] Chuang M H, Tsai M H, Wang W R, Lin S J, Yeh J W. Microstructure and wear behavior of AlxCo1.5CrFeNi1.5Ti<sub>y</sub> high-entropy alloys [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(16): 6308-6317.
- [5] Chang S Y, Li C E, Huang Y C, Hsu H F, Yeh J W, Lin S J. Structural and thermodynamic factors of suppressed interdiffusion kinetics in multi-component high-entropy materials [J]. *Scientific Reports*, 2014, 4: 4162.
- [6] Shi Y, Yang B, Xie X, Brechtl J, Dahmen K A, Liaw P K. Corrosion of AlCoCrFeNi high-entropy alloys: Al-content and potential scan-rate dependent pitting behavior [J]. *Corrosion Science*, 2017, 119: 33-45.
- [7] Shi Y, Yang B, Liaw P. Corrosion-resistant high-entropy alloys: A review [J]. *Metals*, 2017, 7(2): 43.
- [8] 胡远啸, 双思垚, 王冰, 张燮, 张旭. CrMnFeCoNi 高熵合金纳米晶温度相关的拉伸行为研究 [J]. *固体力学学报*, 2020, 41(02): 109-117. (Hu Y X, Shuang S Y, Wang B, Zhang X, Zhang X. Temperature-dependent tensile behavior of nanocrystalline CrMnFeCoNi high-entropy alloy [J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*. 2020, 41(02): 109-117. (in Chinese))
- [9] Yi H L, Wei D X, Wang Y C, Wang L Q, Fang M Y, Yang K, Kato H. Hot deformation and dynamic recrystallization behavior of CoCrNi and (CoCrNi)<sub>94</sub>Ti<sub>3</sub>Al<sub>3</sub> medium entropy alloys [J]. *Metals*, 2020, 10(10): 1341.
- [10] Savaedi Z, Motallebi R, Mirzadeh H. A review of hot deformation behavior and constitutive models to predict flow stress of high-entropy alloys [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 903: 163964.
- [11] Zerilli F J, Armstrong R W. Dislocation-mechanics-based constitutive relations for material dynamics calculations [J]. *Journal of Applied Physics*, 1987, 61(5): 1816-1825.
- [12] Johnson G R, Cook W H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 1985, 21(1): 31-48.
- [13] Sellars C M, McTegart W J. On the mechanism of hot deformation [J]. *Acta Metallurgica*, 1966, 14(9): 1136-1138.
- [14] Brown C, Mccarthy T, Chadha K, Rodrigues S, Aranas C, Saha G C. Constitutive modeling of the hot deformation behavior of CoCrFeMnNi high-entropy alloy [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2021, 826: 141940.
- [15] Patnamsetty M, Ghosh S, Somani M C, Peura P. Characterization of hot deformation behavior of Al<sub>0.3</sub>CoCrFeNi high-entropy alloy and development of processing map [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 914: 165341.
- [16] Liu X, Tian S, Tao F, Yu W B. A review of artificial neural networks in the constitutive modeling of composite materials [J]. *Composites Part B: Engineering*, 2021, 224: 109152.
- [17] Jang D P, Fazily P, Yoon J W. Machine learning-based constitutive model for J2- plasticity [J]. *International Journal of Plasticity*, 2021, 138: 102919.
- [18] Ahmadi H, Rezaei Ashtiani H R, Heidari M. A com-

- parative study of phenomenological, physically-based and artificial neural network models to predict the Hot flow behavior of API 5CT-L80 steel [J]. *Materials Today Communications*, 2020, 25: 101528.
- [19] Jain R, Jain A, Rahul M R, Kumar A, Dubey M, Sabat R K, Samal S, Phanikumar G. Development of ultrahigh strength novel CoCrFeNiZr quasi-peritectic high entropy alloy by an integrated approach using experiment and simulation [J]. *Materialia*, 2020, 14: 100896.
- [20] Zener C, Hollomon J H. Effect of strain rate upon plastic flow of steel [J]. *Journal of Applied Physics*, 1944, 15(1): 22-32.
- [21] Ge G, Zhang L, Xin J, Lin J, Anidow M. Constitutive modeling of high temperature flow behavior in a Ti-45Al-8Nb-2Cr-2Mn-0.2Y alloy [J]. *Scientific Reports*, 2018, 8: 1-9.
- [22] Chadha K, Shahriari D, Jahazi M. Constitutive modelling of ingot breakdown process of low alloy steels [J]. *Metallurgia Italiana*, 2016, 108(4): 5-12.
- [23] Sajadi S A, Toroghinejad M R, Rezaeian A, Ebrahimi G R. Research on hot deformation behavior and constitutive model to predict flow stress of an annealed FeCrCuNi2Mn2 high-entropy alloy [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, 937: 168267.
- [24] Wang X, Zhang Y, Ma X. High temperature deformation and dynamic recrystallization behavior of AlCrCuFeNi high entropy alloy [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2020, 778:139077.

# A Neural Network-assisted Theoretical Constitutive Model to Predict the High Temperature Flow Behavior of High-entropy Alloys

Jian Jiang    Tao Hu    Sanshao Zhuang    Miaolin Feng

(State Key Laboratory of Ocean Engineering, Department of Engineering Mechanics, School of Naval Architecture, Ocean and Civil Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, 200240)

**Abstract** Metals and alloys are widely used in industry due to their excellent mechanical properties. Researchers have been continuously searching new materials with better properties or mechanisms to enhance existing ones. In the metal and alloy forming process, hot deformation can effectively refine the grain and improve mechanical properties such as yield strength and tensile strength. Therefore, it is necessary to study the deformation behavior of metal and alloy materials at high temperatures. The hyperbolic-sinusoidal Arrhenius-type model has been widely used by researchers because of its good simulation effect at high temperatures. In this paper, the building process of the model is studied, and the modeling process is optimized with the help of a neural network model. A neural network model is constructed to efficiently determine the hyperbolic-sinusoidal Arrhenius-type equations, based on which the flow stress of high-entropy alloys(HEAs) for different high temperatures and strain rates can be well predicted. The reported hot deformation behaviors of  $\text{Al}_{0.3}\text{CoCrFeNi}$  HEAs are examined by current model. The results show that the coefficients obtained by the neural network method can better describe the experimental hot flow stress, especially at high strain rate or low temperature conditions. The root-mean-square error(RMSE) and the correlation coefficient R are used to assess the degree of difference between the results. The RMSE and R of the neural network method at total data are 27.7 and 0.985, respectively, which are better than 33.1 and 0.979 of the traditional method. To show the general applicability of the model, the hot deformation behaviors of  $(\text{CoCrNi})_{94}\text{Ti}_3\text{Al}_3$ ,  $\text{FeCrCuNi}_2\text{Mn}_2$ , and  $\text{AlCrCuFeNi}$  are analyzed by the model. The research work presented in this paper can improve the efficiency and accuracy of the hyperbolic-sinusoidal Arrhenius-type model and reduce the difficulty of establishing the model, and is of positive significance for the wide use of the model.

**Key words** high-entropy alloys, high-temperature deformation, neural network, constitutive equation