

Научная статья

Способы подбора материальных констант для эффекта стабилизации мартенсита в микроструктурной модели сплавов с памятью формы

Т.В. Ребров^{1,2}, Ф.С. Беляев^{1,2}, А.Е. Волков¹, Е.А. Вуколов¹, М.Е. Евард¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Российская Федерация

² Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Эффект стабилизации мартенсита оказывает существенное влияние на термомеханический отклик сплавов с памятью формы и требует его корректного учёта при численном моделировании. Ранее авторами в рамках микроструктурного подхода разработана модель, базирующаяся на гипотезе о повреждении межмартенситных границ и позволяющая описывать этот эффект в сплавах TiNi. В данной работе рассмотрены четыре подхода к идентификации материальных постоянных модели: ручной, детерминированный метод Нелдера–Мида, стохастический генетический алгоритм и нейросетевой подход на основе архитектуры Deep Sets. Используются известные из литературы результаты экспериментов на сплавах никелида титана Ti₅₀Ni₅₀ и Ti₄₉Ni₅₁, воспроизводящих три характерных способа задания предварительной деформации: в виде растягивающей деформации в мартенситном состоянии; как охлаждения под постоянной нагрузкой; путём наведения мартенсита напряжениями. Подбор параметров модели нацелен на минимизацию функции невязки между расчётными и экспериментальными сдвигами температуры начала обратного мартенситного превращения. Выполнено сравнение точности и вычислительной эффективности методов определения параметров для двух сплавов. Результаты показывают, что метод Нелдера–Мида и генетический алгоритм обеспечивают сопоставимое качество аппроксимации экспериментальных данных при умеренных вычислительных затратах и простой настройке. Нейросетевой подход даёт менее точное соответствие расчёта и эксперимента, позволяет за короткий промежуток времени получить константы после обучения, однако требует предварительной генерации объёмного тренировочного датасета и демонстрирует повышенную чувствительность к начальным условиям обучения. Полученные результаты подтверждают применимость перечисленных подходов для автоматизированного подбора параметров моделей сплавов с памятью формы.

Ключевые слова: сплавы с памятью формы, эффект стабилизации мартенсита, никелид титана, метод Нелдера–Мида, генетический алгоритм, нейросеть

Получение: 03.04.2026 / Публикация онлайн: 05.08.2026

УДК 539.3

1. Введение

Сплавы с памятью формы (СПФ) являются функциональными материалами, испытывающими термоупругие мартенситные превращения (МП) при изменении температуры и/или напряжения. В ходе прямого МП высокосимметричная аустенитная фаза переходит в низкосимметричную мартенситную, при обратном превращении имеет место возврат к исходной аустенитной структуре. Если обратное МП служит результатом нагрева, то реализуется эффект памяти формы — восстановление предварительной деформации или полученной в ходе предшествующего прямого МП при охлаждении под нагрузкой, или же заданной в виде активной деформации образца в мартенситном состоянии. Если обратное превращение приходится на разгрузку, то материал ведёт себя как псевдоупругий — восстанавливается деформация, вызванная предшествующим прямым МП в процессе нагружения [1, 2].

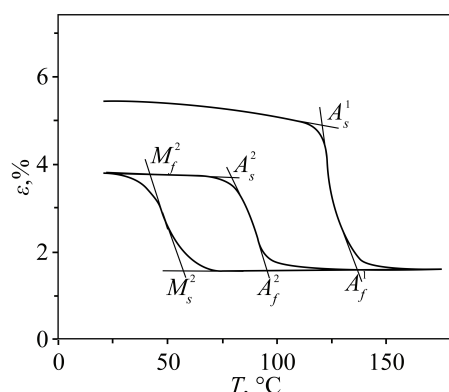


Рис. 1. Схематичное изображение зависимости деформации от температуры, иллюстрирующее ЭСМ после предварительной активной деформации в мартенситном состоянии; A_s^1 и A_f^1 , A_s^2 и A_f^2 — температура начала и окончания обратного МП в 1-м и 2-м циклах охлаждения–нагрева, M_s^2 и M_f^2 — температура начала и окончания прямого МП во 2-м цикле

Важнейшими характеристиками СПФ являются температура начала и окончания прямого МП — M_s , M_f , и обратного МП — A_s , A_f . Эти параметры задают температурные интервалы фазовых переходов и играют ключевую роль при моделировании термомеханического отклика материала. СПФ находят широкое применение в промышленности и медицине. При этом их эксплуатационные свойства зависят от множества факторов, один из которых — эффект стабилизации мартенсита (ЭСМ) — обнаруживает себя как увеличение температуры обратного МП, вызванного предварительной деформацией. В повторном цикле охлаждения–нагрев в свободном состоянии данный эффект не наблюдается (Рис. 1).

ЭСМ присущ разным СПФ: медным сплавам Cu–Zn–Al [3–6], Cu–Al–Be [7–9], Cu–Ni–Al [10–12], сплавам на основе железа [13], сплавам Гейслера [14, 15], никелиду титана [13, 16–31]. При этом выделяют химическую (гомогенную) и механическую (гетерогенную) составляющие стабилизации [3, 5].

Формирование представлений о химической стабилизации мартенсита связывается с исследованиями β -сплавов на основе меди, а в их систематизацию существенный вклад внесли работы С. Кустова и соавторов [3–9]. В [5] на основе анализа калориметрических данных предложено разделять стабилизацию на две принципиально разные составляющие — химическую и механическую. Химическая стабилизация трактуется как увеличение температуры обратного превращения вследствие атомного переупорядочения в мартенсите, приводящего к снижению его химической свободной энергии G_M . Из-за этого повышается равновесная температура превращения T_0 , происходит «чистый сдвиг» температуры начала и конца обратного МП без существенного расширения температурного интервала превращения; химическая стабилизация возможна при изотермической выдержке образцов в мартенситном состоянии [32–34].

Причине возникновения ЭСМ в никелиде титана посвящено множество публикаций [16–31]. В одной из первых работ [17] эффект связывается с накоплением дислокаций и вакансий, затрудняющих движение мартенситных границ. В работах [19, 21, 22] показано, что различные механизмы деформации по-разному влияют на ЭСМ, и это не позволяет дать однозначного толкования. В работе [23] ЭСМ объяснён внутренними напряжениями, возникающими при пластическом скольжении вследствие несовместности деформаций зёрен и их границ. Исходя из этого предложена реологическая модель, описывающая основные проявления эффекта. Однако последующее наблюдение ЭСМ в монокристаллах [24] поставило под сомнение решающую роль границ зёрен и пластического течения.

ЭСМ также исследовался А.А. Мовчаном и соавторами [13, 35]. В работе [13] анализируются экспериментальные данные для СПФ на основе железа и никелида титана. Отмечается, что температура начала обратного превращения в никелиде титана существенно возрастает с накоплением фазово-структурной деформации даже при нулевых напряжениях. Авторы связывают ЭСМ именно с фазово-структурной, а не с пластической деформацией, и предполагают, что при приближении предварительной деформации к предельному значению скорость повышения температуры обратного превращения должна стремиться к нулю. Для СПФ на основе железа в этой работе выявлена противоположная тенденция: температура уменьшалась при росте предварительной деформации. В продолжении этой работы, в [35], для описания эффекта предложено в рассматриваемую термодинамическую модель к потенциалу Гиббса добавить слагаемое, связанное с фазово-структурной деформацией. Этот приём позволил описать изменение температуры начала обратного превращения при нулевых напряжениях.

Таким образом, химическая стабилизация наиболее отчётливо проявляется в медных β -сплавах, в которых атомное переупорядочение в мартенсите приводит к снижению его химической свободной энергии и чистому сдвигу температуры начала обратного превращения. В сплавах на основе TiNi условия для такого изменения внутренней структуры существенно ограничены вследствие высокой степени исходной организованности и низкой диффузионной подвижности атомов в диапазонах температур существования мартенсита. В результате в этих системах преобладает механическая стабилизация.

Предлагаемая вниманию читателя работа направлена на описание ЭСМ в сплавах TiNi, поэтому механическая составляющая эффекта представляет наибольший интерес. В ней обсуждаются результаты продолжения исследований, начатых в [36–38]; здесь, как и в [28], принимается предположение, что основной причиной ЭСМ является повреждение межмартенситных границ, которое затрудняет обратное превращение и исчезает после полного перехода материала в аустенит, так что при повторном цикле охлаждение–нагрев сдвиг ни температуры A_s , ни температуры A_f не наблюдается. В работах [36–38] микроструктурная модель СПФ дополнена уравнениями, позволяющими описывать ЭСМ для различных сплавов. Для их интегрирования необходимо знать не только базовые характеристики исследуемого материала, но и специфические параметры, влияющие на сдвиг температуры обратного превращения. Подбор этих параметров в [36–38] осуществлён исключительно вручную, с большими затратами по времени. В данной работе рассматривается несколько способов формализации и ускорения подбора констант (выбор вручную, метод Нелдера–Мида, генетический алгоритм, нейросеть) и выполняется их сравнение.

2. Модель

Модель СПФ, для которой производился подбор констант, подробно описана в работах [36–39]. Основная суть, важная для понимания результатов данной статьи, заключается в том, что прямое и обратное превращения в используемой модели происходят при достижении обобщённой термодинамической силой некоего предела F^{fr} , условно называемого «силой трения». Согласно гипотезе из работы [28] причиной ЭСМ является повреждение границ мартенсита, поэтому в модель вводится переменная ζ — мера повреждённости границ, изменение которой рассчитывается по формулам:

$$d\zeta = k_1 \frac{(\Phi_M - \Phi_{\text{crit}})\mathcal{H}(\Phi_M - \Phi_{\text{crit}})}{(1 - \Phi_{\text{crit}})(1 + k_3\zeta^2)} d\tilde{r} \mathcal{H}(d\tilde{r}), \quad (1)$$

$$d\zeta = \frac{\zeta_1 - \zeta}{\Phi_M(1 + k_3\zeta^2)} d\Phi_M \mathcal{H}(d\Phi_M), \quad (2)$$

$$d\zeta = 0, \quad (3)$$

$$\zeta_1 = k_2 \frac{(\Phi_M - \Phi_{\text{crit}}) \mathcal{H}(\Phi_M - \Phi_{\text{crit}})}{1 - \Phi_{\text{crit}}} \tilde{r}. \quad (4)$$

В выражениях (1)–(4) Φ_M означает объёмную долю мартенсита, $\mathcal{H}(\cdot)$ — функцию Хевисайда, а $d\Phi_M$ и $d\tilde{r}$ — приращения соответствующих величин; переменная $\tilde{r} = r/\Phi_M$ (где $r = \frac{1}{2(N-1)} \sum_{q=1}^N |\Phi_q - \Phi_M|$) характеризует степень ориентированности мартенсита: $\tilde{r} = 0$ — текстура хаотическая, $\tilde{r} = 1$ — полностью монодоменизированный мартенсит; Φ_q — доля q -го мартенситного варианта, N — число мартенситных вариантов. Уравнение (1) описывает изменение переменной ζ при переориентации мартенсита, уравнение (2) — при прямом МП, а уравнение (3) — при обратном превращении, формула (4) задаёт «устойчивое» значение повреждённости ζ_1 при заданных Φ_M и $\tilde{r}$. В формулы входят материальные константы модели $k_1, k_2, k_3, \Phi_{\text{crit}}$, при этом k_1 определяет интенсивность накопления повреждённости при переориентации мартенсита, а k_2 — при прямом превращении; k_3 характеризует скорость выхода параметра ζ на уровень насыщения, Φ_{crit} — критическую объёмную долю мартенсита, при достижении которой в процессе прямого МП начинается рост повреждённости. На основе экспериментов из [28] в данной работе выбрано её значение $\Phi_{\text{crit}} = 0.3$; при помощи автоматизированных алгоритмов величина Φ_{crit} не подбиралась.

В рамках принятой гипотезы предполагается, что $F_{\text{MSE}}^{\text{fr}}$ — диссипативная сила сопротивления движению границ мартенсита возрастает с увеличением параметра повреждённости. Исходя из этого для её расчёта используется соотношение:

$$F_{\text{MSE}}^{\text{fr}} = F^{\text{fr}} (1 + \zeta^k),$$

где F^{fr} — базовая сила сопротивления движению неповреждённых границ, k — константа материала, которая в данной работе не подбирается ввиду отсутствия ясной физической интерпретации, взято $k = 2$. Далее величина $F_{\text{MSE}}^{\text{fr}}$ входит в критерий обратного превращения как дополнительное ограничение для термодинамической движущей силы. Поэтому увеличение ζ повышает порог начала обратного превращения и в температурном представлении приводит к сдвигу температуры начала обратного МП A_s в сторону более высоких значений. Таким образом, алгоритм сдвига A_s реализуется не в виде отдельного эмпирического уравнения для температуры, а непосредственно через изменение пороговой силы $F_{\text{MSE}}^{\text{fr}}$, зависящей от ζ .

3. Результаты подбора констант

Константы модели k_1, k_2, k_3 находятся для сплавов $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ и $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ на основе данных (Табл. 1), полученных в работе [28] при реальных испытаниях трёх видов:

1-й вид — активная деформация в мартенситном состоянии: деформирование → разгрузка → нагрев;

2-й вид — охлаждение под нагрузкой: нагрузка в аустенитном состоянии → охлаждение до мартенсита → разгрузка → нагрев;

3-й вид — наведение мартенсита напряжениями: нагрузка в аустените при температуре T , где $M_s < T < A_s$, → разгрузка → нагрев.

В данной работе для идентификации параметров модели применяются разные способы: ручной выбор, вычисление детерминированным методом Нелдера–Мида и посредством реализации стохастического генетического алгоритма, определение нейросетевым методом на основе архитектуры Deep Sets. После

Таблица 1. Остаточная деформация после разгрузки при разном сдвиге температуры начала обратного МП в реальных экспериментах [28] для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$

Номер испытания j	Вид эксперимента	Остаточная деформация $e_u, \%$	Сдвиг температуры $\Delta A_s, \text{K}$
1	1-й	2.55	27
2		4.13	39
3		5.87	48
4		7.96	58
5		13.09	63
6	2-й	2.14	1
7		3.17	2
8		6.06	10
9		13.66	12
10		16.79	10
11	3-й	2.34	-8
12		4.04	1
13		5.87	10
14		8.15	17
15		12.46	30

описания всех способов приведены графики, построенные по установленным числовым значениям параметров, позволяющие выполнить сравнение подходов и оценить эффективность каждого из них на примерах сплавов $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ и $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$.

3.1. Ручной подбор

При подборе вручную учитывается следующее: так как параметр k_1 отвечает преимущественно за рост ζ при переориентации, то он значительно влияет на сдвиг температуры в эксперименте 1-го вида и совсем незначительно во 2-м; k_2 , наоборот, больше сказывается на результатах эксперимента 2-го вида и меньше — на результатах 1-го. Однако обе константы существенно воздействуют на эксперимент 3-го вида. Таким образом, основная сложность определения параметров модели ручным способом заключается в создании согласованного набора констант, который хорошо описывает любые смешанные виды экспериментов. Получены следующие значения констант для СПФ $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$: $k_1 = 5.6$; $k_2 = 4.0$; $k_3 = 1.0$, и для СПФ $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$: $k_1 = 2.2$; $k_2 = 4.0$; $k_3 = 0.3$.

3.2. Метод Нелдера–Мида

Метод Нелдера–Мида — оптимизационный метод, предназначенный для минимизации скалярной функции и не требующий информации о градиентах и производных [40]. Это делает его подходящим для задач, где функция имеет вид «чёрного ящика», например, при поиске материальных параметров, когда каждое значение функции требует вычислений в сторонней модели. Метод уже применялся для подбора других констант этой же модели в работе [41].

В рамках данной работы метод Нелдера–Мида используется для минимизации невязки — *fitness*, между теоретическими (расчётными) и реальными (из натурных экспериментов) параметрами стабилизации мартенсита. Невязки рассчитываются по результатам $n = 15$ реальных и вычислительных экспериментов:

$$fitness = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\Delta A_{s,\text{exp}}^j - \Delta A_{s,\text{th}}^j)^2},$$

где j — номер эксперимента, $n = 15$ — общее число экспериментов, $\Delta A_{s,\text{exp}}^j$ — сдвиг температуры A_s в j -м реальном эксперименте, а $\Delta A_{s,\text{th}}^j$ — соответствующий расчётный сдвиг. Данные о реальных сдвигах температуры $\Delta A_{s,\text{exp}}^j$ берутся из работы [28]. Для построения зависимостей сдвига температуры начала обратного МП ΔA_s от остаточной деформации после разгрузки e_u используется по пять точек для каждого вида испытания (Табл. 1). Расчёты производятся численно по модели с такими же e_u , посчитаны теоретические сдвиги $\Delta A_{s,\text{th}}^j$ при допуске по деформации 10%.

В общем случае алгоритм Нелдера–Мида работает с симплексом, у которого $m+1$ вершин в m -мерном пространстве. В рассматриваемой задаче оптимизируются три параметра: k_1, k_2, k_3 , поэтому симплексом является тетраэдр с вершинами $x_1, x_2, x_3, x_4 \in \mathbb{R}^3$. Одна итерация метода состоит из шагов:

- 1) В вершинах тетраэдра вычисляются значения функции *fitness* и по её возрастанию вершины упорядочиваются:

$$fitness(x_1) \leq fitness(x_2) \leq fitness(x_3) \leq fitness(x_4).$$

Здесь x_1 соответствует минимальному, а x_4 — максимальному значению целевой функции в текущем симплексе.

- 2) По значениям x_1, x_2, x_3 находится центр тяжести $x_c = (x_1 + x_2 + x_3)/3$ и строится отражённая точка $x_r = x_c + (x_c - x_4)$.
- 3) Если $fitness(x_r) < fitness(x_1)$, выполняется расширение $x_e = x_c + 2(x_r - x_c)$. В следующий симплекс вместо x_4 включается x_e при условии $fitness(x_e) < fitness(x_r)$, иначе вместо x_4 в работу вступает точка x_r .
- 4) Если $fitness(x_1) \leq fitness(x_r) < fitness(x_3)$, отражённая точка x_r в следующем симплексе заменяет точку x_4 без дополнительных преобразований.
- 5) Если отражение не принято, осуществляется сжатие. При $fitness(x_r) \geq fitness(x_4)$ используется внутреннее сжатие $x_{in} = x_c - (x_c - x_4)/2$; при $fitness(x_3) \leq fitness(x_r) < fitness(x_4)$ — внешнее сжатие $x_{out} = x_c + (x_r - x_c)$. Полученная точка вступает в работу в следующем симплексе, если в ней значение функции меньше сравниваемого значения: $fitness(x_{in}) < fitness(x_4)$ или $fitness(x_{out}) < fitness(x_r)$.
- 6) Если сжатие не принято, все вершины, кроме x_1 , смещаются к x_1 :

$$x_i^{\text{new}} = x_1 + (x_i - x_1)/2, \quad i = 2, 3, 4.$$

Блок-схема процесса изображена на рисунке 2. На рисунке 3 описанные шаги показаны наглядно на примере симплекса с числом вершин $m+1 = 3$. Процесс повторяется до выполнения одного из критериев сходимости: $\max_{i=2,3,4} |fitness(x_i) - fitness(x_1)| < \varepsilon$, или $fitness(x_1) < \varepsilon$, или до достижения предела по числу итераций. Здесь ε — заданный допуск сходимости.

Для k_1, k_2, k_3 опытным путём были выбраны естественные ограничения: $k_1 \in [0, 10]$, $k_2 \in [0, 20]$, $k_3 \in [0, 5]$. Начальный симплекс выглядел так: $\{k_1, k_2, k_3\} = \{5.0, 10.0, 2.5\}, \{6.5, 10.0, 2.5\}, \{5.0, 12.5, 2.5\}, \{5.0, 10.0, 3.2\}$.

Методом Нелдера–Мида найдены значения констант: для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ — $k_1 = 5.98$, $k_2 = 4.63$, $k_3 = 1.21$ при невязке $\text{fitness} = 5.14$ К; для сплава $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ — $k_1 = 1.46$, $k_2 = 3.10$, $k_3 = 0.00$ при невязке $\text{fitness} = 9.10$ К.

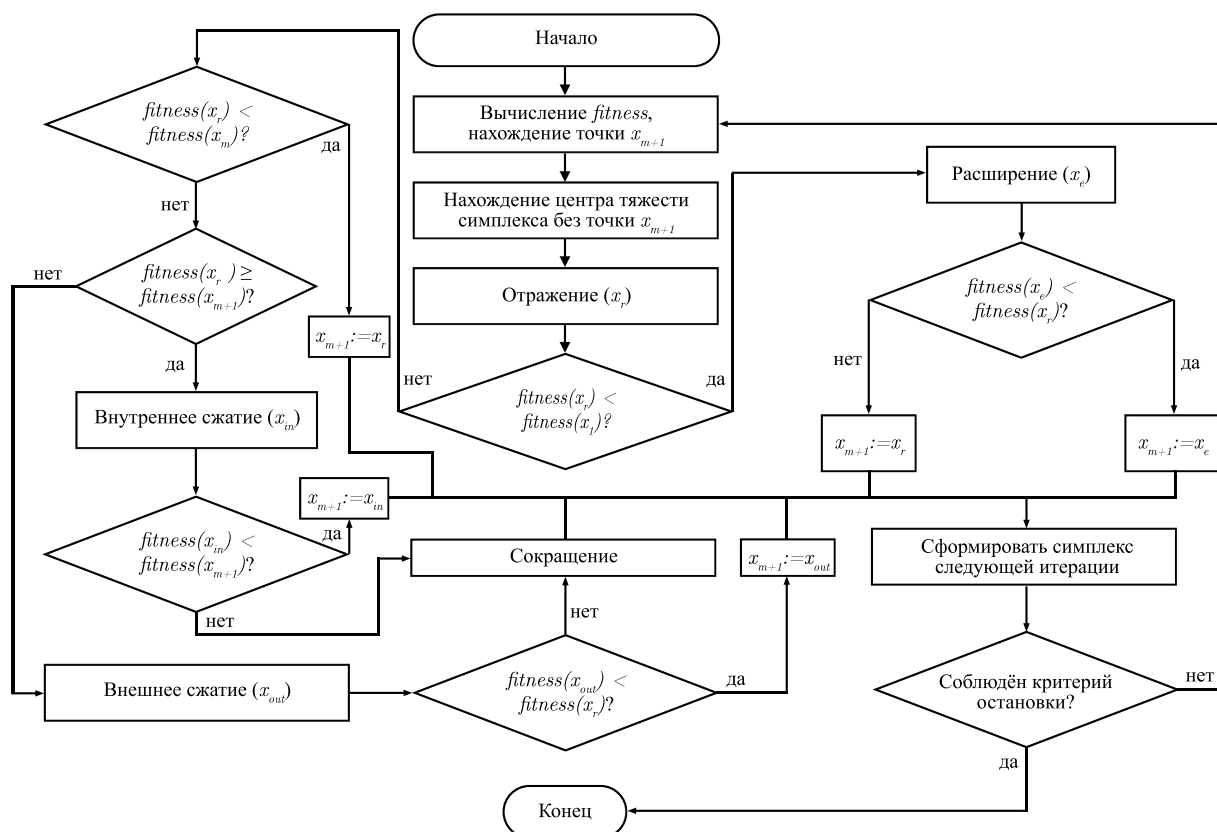


Рис. 2. Блок-схема, описывающая принцип работы метода Нелдера–Мида

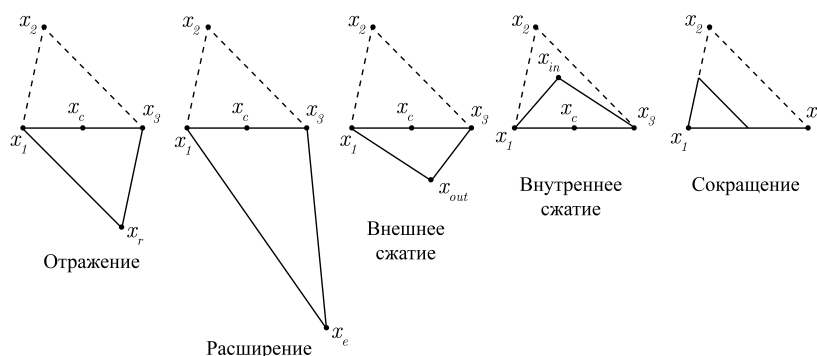


Рис. 3. Визуализация операций метода Нелдера–Мида в двумерном случае

3.3. Генетический алгоритм

Генетический алгоритм относится к классу эволюционных стохастических методов оптимизации, имитирующих механизмы естественного отбора: наследование, скрещивание и мутации. В отличие от классических детерминированных методов, он обладает высокой устойчивостью к локальным минимумам и хорошо работает в условиях сложных, разрывных или шумных ландшафтов целевой функции, что особенно важно для задач, в которых каждая оценка функции связана с запуском крупного вычислительного модуля. Аналогичные генетические алгоритмы используются для подбора констант в различных моделях: ферментативного выпота, качества воды и конститутивных моделях механики [42–44].

Генетический алгоритм оперирует популяцией кандидатов (особей) — параметрических векторов $\{k_1, k_2, k_3\}$, компоненты которых называются генами. Они итеративно улучшаются путём применения трёх основных генетических операторов:

1) Отбор — выбор лучших решений.

- 2) Скрещивание — рекомбинация параметров двух кандидатов.
- 3) Мутация — локальная случайная модификация параметров.

На 1-м шаге алгоритма создаётся случайная популяция заданного размера. Каждый кандидат сразу оценивается по значению функции приспособленности — той же функции *fitness*, которая описана выше. Функция *fitness* вызывает 15 запусков микроструктурной модели для вычисления ΔA_s^{th} .

Далее проводится турнирный отбор: из трёх случайно выбранных особей побеждает та, у которой значение *fitness* минимально (лучшая приближённость к эксперименту). Победители турнира становятся «родителями» для скрещивания и получения особей следующей популяции. Скрещивание срабатывает с определённой вероятностью, при этом гены «детей» $\{k_1, k_2, k_3\}$ рассчитываются по формуле:

$$C_i = \alpha \cdot P_i^1 + (1 - \alpha) \cdot P_i^2,$$

где $C_i = k_i$ — ген «ребёнка», $P_i^1 = k_i$ — ген первого «родителя», $P_i^2 = k_i$ — ген второго «родителя», α — случайная величина от 0 до 1. Если скрещивания не происходит, «ребёнок» полностью наследует гены первого «родителя»: $C_i = P_i^1$.

С некоторой вероятностью гены «детей» испытывают гауссовскую мутацию — их значения изменяются в определённых пределах:

$$k_i^{\text{new}} = k_i + R_i \cdot s \cdot e,$$

где k_i^{new} — мутировавший ген, k_i — исходный ген, R_i — диапазон вариации гена (ограничения на k_i), s — диапазон мутаций, e — стандартная случайная гауссовская величина со средним значением 0 и стандартным отклонением 1. Благодаря такому механизму обеспечивается локальное исследование окрестности решений.

Кроме этого, применяемый генетический алгоритм использует свойство элитизма: лучшая особь всегда копируется в следующую популяцию без изменений. Это гарантирует монотонное улучшение найденного решения от поколения к поколению. Оптимизация выполняется для фиксированного числа поколений.

В данной работе выбраны следующие параметры генетического алгоритма: размер популяции — 20; число поколений — 25; вероятность скрещивания — 0.9; вероятность мутации — 0.2; диапазон мутаций — 0.1.

На основе генетического алгоритма подобраны следующие константы: для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ — $k_1 = 6.68$, $k_2 = 4.92$, $k_3 = 1.43$ при значении *fitness* = 5.14 К; для сплава $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ — $k_1 = 1.49$, $k_2 = 3.11$, $k_3 = 0.00$ при значении *fitness* = 9.12 К. Зависимости сдвига температуры ΔA_s от деформации после разгрузки показаны на рисунках после описания всех способов подбора параметров.

3.4. Нейросеть

Нейросети применяются для подбора констант в различных моделях. Так, в работе Майсснера с соавторами [45] выполнен подбор параметров упругопластической модели MAT024 в программном комплексе LS-DYNA на основе полносвязной нейросети прямого распространения — Feed-Forward Artificial Neural Network (FFANN), обученной решать обратную задачу подбора параметров по диаграмме нагружения. Показано, что нейросетевое определение параметров по кривой текучести обеспечивает воспроизведение экспериментальных диаграмм сила–перемещение с точностью, сопоставимой, а в ряде случаев превосходящей точность классического итерационного метода оптимизации (LS-OPT), при существенно меньших вычислительных затратах. Каупом и соавторами [46] термодинамические параметры макроскопической одномерной модели СПФ подбираются с помощью полносвязной нейросети прямого распространения, обученной в постановке обратной задачи по циклическим диаграммам напряжение–деформация. Показано, что параметры теплоёмкости, теплообмена и скрытой теплоты, определённые нейросетью, обеспечивают высокую точность воспроизведения экспериментальных откликов, в том числе эффектов скоростной и амплитудной зависимости. В работе Ленцена и соавторов [47] выполнена идентификация параметров термомеханической модели СПФ с использованием многослойной FFANN, восстанавливающей до десяти механических и термодинамических параметров по экспериментальным циклическим кривым. Графики, построенные по данным численных расчётов со значениями параметров, полученными нейросетью, корректно воспроизводят экспериментальные диаграммы нагружения и разгрузки, при этом точность ограничена главным образом допущениями, принятыми в самой модели. В [48] разработан гибридный метод подбора параметров континуальной модели бародезии (модели конститутивной теории) для сыпучих материалов, основанный на нейросети с понижением размерности, обученной на данных численного моделирования бессеточным методом MESHFREE, предназначенным для решения задач гидро- и аэродинамики, а также механики сплошных сред. Показано, что нейросеть восстанавливает параметры модели со средней относительной ошибкой порядка 10^{-3} и обеспечивает практически полное совпадение расчётных и эталонных напряжений при верификационных расчётах. Таким образом, нейросетевой подход хорошо показывает себя при подборе констант различных моделей и может рассматриваться как альтернатива классическим методам оптимизации.

Для подбора постоянных модели при помощи нейросети нужно её обучить, а для этого необходимо сгенерировать тренировочную информацию — датасет, выбрать модель и метод.

3.4.1. Генерация датасета. Обучающий датасет, представляемый в виде таблицы, генерируется при помощи многократного запуска модели СПФ и состоит из блоков данных, полученных в 15 вычислительных экспериментах с одним и тем же для каждого блока набором значений констант k_1 , k_2 , k_3 . Таблица 2 — один из блоков со

Таблица 2. Остаточная деформация после разгрузки, сдвиг температуры начала и конца обратного МП в модельных экспериментах

Номер испытания j	Вид эксперимента	k_1	k_2	k_3	Остаточная деформация e_u , %	Сдвиг температуры ΔA_s , К	Сдвиг температуры ΔA_f , К
1	1-й	0.0	8.7	0.9	2.57	-5.0	1.6
2					4.12	-5.4	2.5
3					5.87	-5.9	4.5
4					7.94	-6.6	6.9
5					13.07	-7.6	7.3
6	2-й				2.13	13.0	17.5
7					3.18	18.3	31.1
8					6.08	32.0	56.3
9					13.67	52.0	72.5
10					16.82	52.0	72.5
11	3-й				2.34	-1.3	11.5
12					4.05	0.8	54.8
13					5.86	12.0	63.8
14					8.15	48.3	67.7
15					12.46	48.3	67.7

значениями констант $k_1 = 0.0$, $k_2 = 8.7$, $k_3 = 0.9$. Первые пять строк относятся к экспериментам 1-го вида, вторые пять строк — к экспериментам 2-го вида, последующие пять строк — к экспериментам 3-го вида. Для каждого испытания записаны сдвиги температуры ΔA_s , ΔA_f и остаточная деформация e_u . Всего создаётся $D = 500$ таких блоков с наборами констант, полученными методом Коробова [49], который выбран для более равномерного распределения постоянных в заданных диапазонах значений.

3.4.2. *Описание модели.* Нейросеть решает задачу вида:

$$X = ((\Delta A_s^1, \Delta A_f^1, e_u^1), \dots, (\Delta A_s^{15}, \Delta A_f^{15}, e_u^{15})) \rightarrow (k_1, k_2, k_3).$$

Здесь X — входной блок из 15 численных экспериментов. Обучению подвергается нейросеть с архитектурой Deep Sets [50]. Её использование обусловлено инвариантностью к перестановкам элементов входного набора: результат работы сети не зависит от порядка, в котором перечислены эксперименты в датасете. Для рассматриваемой задачи это важно, поскольку порядок перечисления экспериментов в обучающей выборке не должен сам по себе влиять на значения идентифицируемых параметров. Входным набором в рассматриваемой задаче являются ΔA_s и ΔA_f — сдвиги температуры начала и окончания обратного МП, и e_u — остаточная деформация после разгрузки. В отличие от полносвязных нейросетей, в которых данные всех экспериментов должны обрабатываться как единый вектор из $3 \cdot 15 = 45$ элементов с различными весами для разных экспериментов, Deep Sets обрабатывает данные каждого эксперимента $(\Delta A_s^i, \Delta A_f^i, e_u^i)$ посредством одной и той же функции φ с общими весами, которая превращает исходные данные в 64-мерный вектор признаков — h_i . Полученные наборы усредняются и подаются во внешнюю нейросеть ρ , благодаря чему каждый эксперимент вносит вклад в общее описание материала, а итоговое представление получается из совокупности данных всех экспериментов. Такой подход исключает неосмысленную зависимость от индекса эксперимента и улучшает переносимость модели на новые наборы испытаний.

Таким образом, Deep Sets сначала анализирует каждую строку отдельно, затем объединяет результаты. Это позволяет описать модель в виде:

$$\mathcal{F}(X) = \rho \left(\frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} \varphi(z_i) \right),$$

где $\mathcal{F}$ — отображение, реализуемое полной нейросетевой моделью, z_i — вектор из трёх значений $(\Delta A_s, \Delta A_f, e_u)$ для i -го эксперимента в блоке, $\varphi(\cdot)$ — внутренняя нейросеть, обрабатывающая каждую строку в отдельности, $\rho(\cdot)$ — внешняя нейросеть, преобразующая усреднённые выходные признаки $\varphi(\cdot)$ в параметры k_1, k_2, k_3 .

Каждая строка состоит из трёх чисел:

$$z_i = (\Delta A_s^i, \Delta A_f^i, e_u^i).$$

Нейросеть преобразует её в вектор:

$$h_i = \varphi(z_i),$$

где φ — это последовательность линейных и нелинейных преобразований:

$$\varphi(z) = \sigma(W_2(\sigma(W_1 z + b_1)) + b_2).$$

Здесь W_1, W_2 — матрицы весов; b_1, b_2 — смещения, подбирающиеся алгоритмом обучения; $\sigma(\cdot) = x/(1 + e^{-x})$ — функция активации *SiLU* (Sigmoid Linear Unit) [51].

После обработки всех строк сеть получает 15 векторов: $h_1, h_2, \dots, h_{15}$, которые усредняются так:

$$H = \frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} h_i, \quad H \in \mathbb{R}^{64}.$$

Финальный блок нейросети ρ принимает на вход вектор H (Рис. 4) и предсказывает параметры:

$$(k_1, k_2, k_3) = \rho(H), \quad \rho(H) = W_5 \sigma(W_4 \sigma(W_3 H + b_3) + b_4) + b_5,$$

где W_i — матрицы весов, b_i — смещения, σ — функция активации $SiLU$.

Полная модель выглядит следующим образом:

$$(k_1, k_2, k_3) = \rho \left(\frac{1}{15} \sum_{i=1}^{15} \varphi(z_i) \right).$$

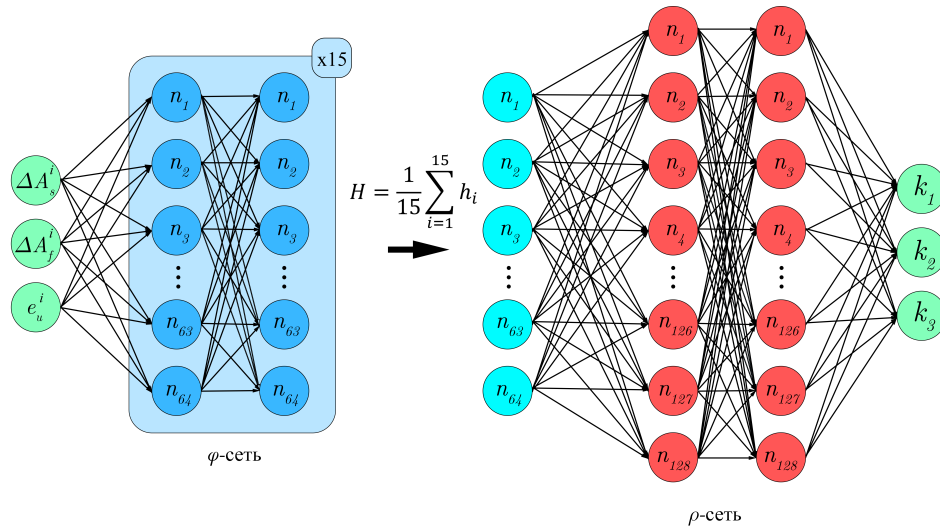


Рис. 4. Структура нейросети с архитектурой Deep Sets

3.4.3. Обучение. Для каждого сгенерированного блока экспериментальных характеристик:

$$X_{\text{block}} = ((\Delta A_s^1, \Delta A_f^1, e_u^1), \dots, (\Delta A_s^{15}, \Delta A_f^{15}, e_u^{15})),$$

нейросеть делает предсказание:

$$(\hat{k}_1, \hat{k}_2, \hat{k}_3) = \mathcal{F}(X_{\text{block}}).$$

Поскольку истинные параметры (k_1, k_2, k_3) известны при генерации датасета, обучение сводится к минимизации расхождения между предсказанными и истинными значениями. В качестве целевой функции используется среднеквадратичное отклонение предсказанных значений параметров от истинных после их предварительной нормализации по ранее заданным пределам:

$$L = \frac{1}{3D} \sum_{d=1}^D \sum_{\ell=1}^3 \left(k_{\ell,d}^{\text{norm}} - \hat{k}_{\ell,d}^{\text{norm}} \right)^2, \quad k_{\ell,d}^{\text{norm}} = \frac{k_{\ell,d} - k_{\ell}^{\min}}{k_{\ell}^{\max} - k_{\ell}^{\min}}.$$

Здесь d — номер блока датасета; $\ell \in \{1, 2, 3\}$ — номер подбираемой константы; верхний индекс norm означает нормированное значение; величины вида $\hat{k}_{\ell,d}^{\text{norm}}$ соответствуют предсказанным нейросетью значениям; $k_{\ell}^{\min}$ и $k_{\ell}^{\max}$ — нижняя и верхняя границы диапазона значений константы k_{ℓ} ; функция L служит критерием качества приближения создаваемого полной нейросетевой моделью обратного отображения $\mathcal{F}: X_{\text{block}} \rightarrow (k_1, k_2, k_3)$. Для повышения устойчивости обучения исходный датасет разделяется на обучающую и валидационную выборки. Обучающая часть требуется непосредственно для обновления параметров модели, тогда как валидационная применяется для контроля обобщающей способности сети и выбора момента остановки обучения. Нейросеть последовательно проходит все обучающие блоки, вычисляет функцию ошибки и корректирует параметры. Один полный проход по всему обучающему набору данных называется эпохой. Обучение включает сотни эпох, что позволяет модели постепенно улучшать аппроксимацию.

В архитектуре нейросети предусмотрен механизм отключения нейронов (dropout), который в процессе обучения случайным образом перекрывает выход для части нейронов, снижает склонность нейронной сети к переобучению, повышает устойчивость к шуму в данных, обеспечивает более надежное восстановление параметров (k_1, k_2, k_3).

Минимизация L осуществляется методом стохастического градиентного спуска с адаптивными моментами AdamW. Алгоритм метода хранит две величины, называемые первым и вторым моментами:

$$m_i^t = \beta_1 m_i^{t-1} + (1 - \beta_1) g_i^t, \quad v_i^t = \beta_2 v_i^{t-1} + (1 - \beta_2) (g_i^t)^2.$$

Здесь t — номер шага обучения; i — номер линейного слоя (1-й и 2-й — слои сети φ , 3-й–5-й — слои сети ρ); $\beta_1 = 0.9$ и $\beta_2 = 0.999$ — коэффициенты сглаживания; $m_i^0 = v_i^0 = 0$; g_i^t — градиент функции L по матрицам весов или векторам смещений слоя i , вычисляемый методом обратного распространения ошибки. Формально данный процесс эквивалентен последовательному применению правила цепочки к композиции отображений, входящих в архитектуру модели, что может быть записано в терминах якобианов слоёв [52].

С использованием моментов параметры модели обновляются по правилу:

$$W_i^{t+1} = W_i^t - \eta \frac{\hat{m}_i^t}{\sqrt{\hat{v}_i^t + \varepsilon_{\text{Adam}}}} - \eta \lambda W_i^t, \quad (5)$$

$$b_i^{t+1} = b_i^t - \eta \frac{\hat{m}_i^t}{\sqrt{\hat{v}_i^t + \varepsilon_{\text{Adam}}}}. \quad (6)$$

В формулах (5) и (6) приняты обозначения: W_i^t и b_i^t — матрица весов и вектор смещений слоя i на шаге обучения t ; $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$; η — скорость обучения; λ — коэффициент весового штрафа; $\hat{m}_i^t = m_i^t / (1 - \beta_1^t)$; $\hat{v}_i^t = v_i^t / (1 - \beta_2^t)$; $\varepsilon_{\text{Adam}} = 10^{-8}$. Начальная скорость обучения равняется $3 \cdot 10^{-4}$ и по мере обучения модели может автоматически уменьшаться до предела в 10^{-6} при отсутствии улучшения значения функции потерь на валидационной выборке в течение 10 последовательных эпох. Таким образом, веса нейросети последовательно адаптируются так, чтобы ошибка вычисления L уменьшалась на обучающем и валидационном поднаборах.

Для предотвращения переобучения используется ранняя остановка. К этому приходится прибегать, если значение валидационной ошибки не улучшается в течение заданного числа эпох. Процесс обучения прекращается, и сохраняется модель с наилучшим качеством аппроксимации. Финальные параметры $\{W_i, b_i\}_{i=1}^5$ определяют нелинейную аппроксимацию обратного перехода от наблюдаемых характеристик блока к искомым константам модели.

3.4.4. Инференс. При подборе констант по данным реального эксперимента формируется блок из 15 строк: $z_1, \dots, z_{15}$, вычисляется $\varphi(z_i)$ для всех строк, строится усреднённый вектор H , запускается финальный блок нейросети $\rho(H)$ и получаются параметры (k_1, k_2, k_3) — этот процесс называется инференсом. Инференс имеет дело с ансамблем моделей, обученных с различными начальными весами. Для каждого результата рассчитывается функция *fitness* и определяется набор констант с её наименьшим значением.

Нейросетевым методом найдены следующие константы: для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ — $k_1 = 9.18$; $k_2 = 4.96$; $k_3 = 2.29$ при значении *fitness* = 6.00 К; для сплава $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ — $k_1 = 1.48$; $k_2 = 0.00$; $k_3 = 0.00$ при значении *fitness* = 13.60 К.

Зависимости сдвига температуры ΔA_s от деформации после разгрузки для всех методов подбора констант (ручного, метода Нелдера–Мида, генетического алгоритма и нейросети Deep Sets) показаны на рисунках 5 и 6 для двух разных СПФ.

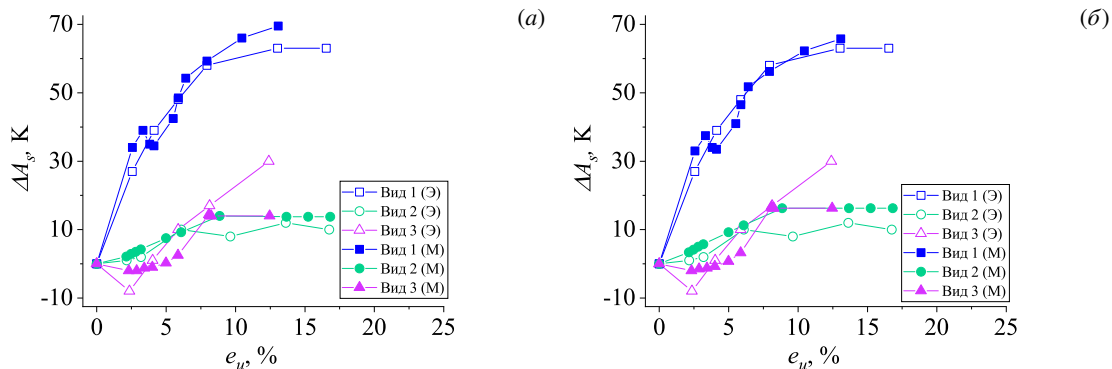


Рис. 5. Зависимости сдвига температуры начала обратного МП при трёх видах экспериментов для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$: М — рассчитанные по модели с константами, подобранными одним из способов (вручную (а), методом Нелдера–Мида (б), при помощи генетического алгоритма (в), с использованием нейросети с архитектурой Deep Sets (з)); Э — установленные в [28] путём натурных испытаний

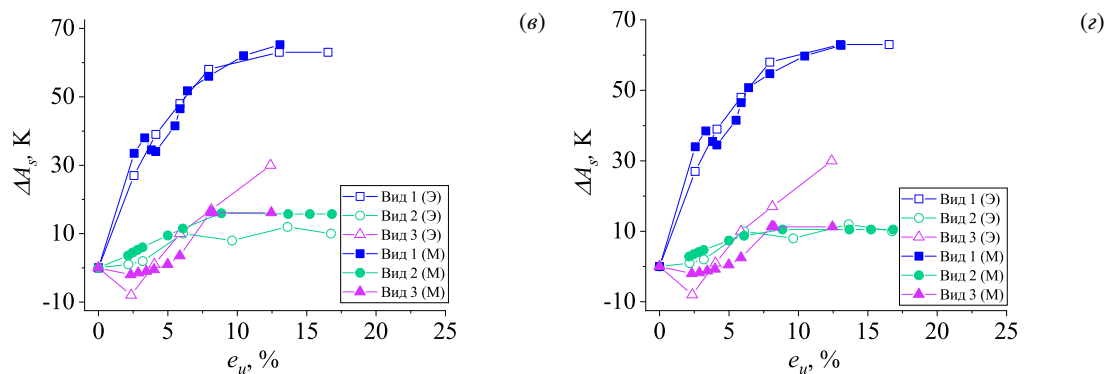
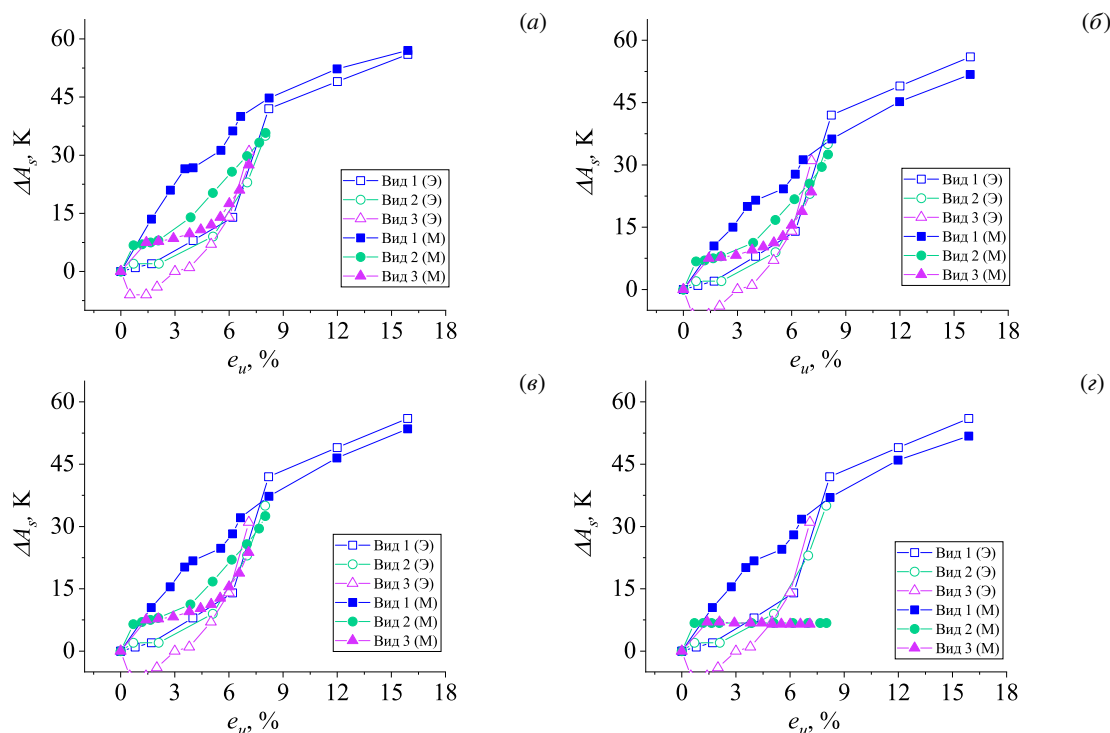


Рис. 5. Продолжение

Рис. 6. Зависимости сдвига температуры начала обратного МП при трёх видах экспериментов для сплава $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$: М – рассчитанные по модели с константами, подобранными одним из способов (вручную (а), методом Нелдера–Мида (б), при помощи генетического алгоритма (в), с использованием нейросети с архитектурой Deep Sets (г)) и Э – установленные в [28] путём натуральных испытаний

4. Сравнительный анализ

Для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ метод Нелдера–Мида и генетический алгоритм обеспечивают как качественное, так и количественное соответствие расчётных и экспериментальных кривых (Рис. 5, Табл. 3). Оба подхода дают значения функции *fitness* меньшие, чем ручной подбор, и достигают близких минимумов за сравнимое время. Нейросетевой подход также позволяет получить удовлетворительное описание эксперимента, однако уступает двум оптимизационным методам по значению функции невязки и оказывается чувствительным к начальным весам: в ансамбле из 100 обученных моделей только 60 дают реалистичный результат, тогда как остальные предсказывают константы на границах заданных диапазонов.

Таблица 3. Найденные значения параметров модели при идентификации по данным реальных экспериментов для сплава с памятью формы $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$

Способ подбора параметров модели	Параметры			Невязка
	k_1	k_2	k_3	<i>fitness</i> , К
Вручную	5.60	4.00	1.00	5.61
Метод Нелдера–Мида	5.98	4.63	1.21	5.14
Генетический алгоритм	6.68	4.92	1.43	5.14
Нейросеть класса Deep Sets	9.18	4.96	2.29	6.00

Отдельного пояснения требует последняя экспериментальная точка, соответствующая деформации 12.5% при 3-м виде предварительной деформации на рисунке 5. Для неё все четыре набора констант дают расчётный сдвиг температуры, заметно отличающийся от экспериментального значения. Это связано с ограничением в самой используемой модели: эволюционные уравнения (1) и (2) устроены так, что при росте предварительной деформации повреждённость границ мартенсита, а вместе с ней и сдвиг температуры обратного превращения выходят на насыщение. За скорость выхода к насыщению отвечает константа k_3 , в знаменателе этих уравнений. Согласно экспериментальным данным, насыщение сдвига температуры наблюдается при 1-м и 2-м видах предварительной деформации, однако для 3-го вида последняя точка такой тенденции не показывает. Поэтому все варианты подбора, будучи в рамках одной и той же модели, воспроизводят насыщение и для 3-го вида деформирования. Дополнительной причиной расхождения может служить различие в способах определения температуры превращения: в исходной работе [28] она определяется методом касательных по графикам зависимости деформации от температуры, тогда как при автоматизированном подборе используется допуск 10% от восстанавливаемой деформации. Такой критерий берется вследствие большого количества обрабатываемых расчётных кривых и возможных локальных артефактов модели. В большинстве случаев он даёт значения, близкие к найденным методом касательных, однако не устраняет полностью влияние локальных артефактов модельного отклика; этим, в частности, объясняется небольшая немонотонность расчётных кривых для экспериментов 1-го вида на рисунке 5.

Для сплава $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ метод Нелдера–Мида и генетический алгоритм также дают меньшие значения *fitness* по сравнению с ручным подбором (Табл. 4), однако количественное соответствие эксперименту оказывается заметно хуже, чем для $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ (Рис. 6). Это также частично объясняется различием способов определения характеристических температур. Кроме того, как показано в работе [37], более точное описание экспериментальных зависимостей для этого сплава возможно при использовании расширенного набора подбираемых констант k , k_1 , k_2 , k_3 . Нейросетевой подход для $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ оказался наименее устойчивым: удовлетворительного количественного описания экспериментальных данных для 2-го и 3-го видов экспериментов получить не удалось.

Таблица 4. Найденные значения параметров модели при идентификации по данным модельных экспериментов для сплава с памятью формы $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$

Способ подбора параметров модели	Параметры			Невязка
	k_1	k_2	k_3	<i>fitness</i> , К
Вручную	2.20	4.00	0.30	11.09
Метод Нелдера–Мида	1.46	3.10	0.00	9.10
Генетический алгоритм	1.49	3.11	0.00	9.12
Нейросеть класса Deep Sets	1.48	0.00	0.00	13.60

С точки зрения устойчивости полученного решения важно отметить, что метод Нелдера–Мида является локальным методом оптимизации, поэтому выбор начального симплекса может влиять как на скорость сходимости, так и на найденный набор констант. При другом начальном симплексе алгоритм может прийти к другому локальному минимуму функции *fitness*. Нахождение глобального минимума предпочтительно, однако для рассматриваемой задачи принципиально важна не единственность набора k_1 , k_2 , k_3 , а достижение требуемой точности описания экспериментальных зависимостей. Сравнение числовых данных этого метода с результатами генетического алгоритма и нейросетевого подхода показывает, что разные наборы материальных констант могут давать близкие значения *fitness* и приемлемое соответствие экспериментальным данным. Поэтому локальный минимум может быть достаточным для практических задач, если обеспечивается требуемая точность расчёта. Одновременно такая неединственность решения указывает на ограниченную идентифицируемость параметров в текущей постановке.

Сравнение методов подбора является неполным без учёта вычислительных затрат. Один вызов целевой функции *fitness* требует выполнения серии из 15 вычислительных экспериментов. Для генетического алгоритма с используемыми параметрами (20 особей и 25 поколений) общее число вызовов целевой функции составляет 500, что соответствует 7500 запускам микроструктурной модели. При этом значение функции *fitness*, совпадающее с итоговым до второго знака после запятой, достигается уже после 2–3 тысяч запусков модели. Метод Нелдера–Мида при выбранном начальном симплексе демонстрирует сопоставимую скорость сходимости: стабилизация значения целевой функции наблюдается после порядка 2–3 тысяч запусков модели. Суммарные временные затраты автоматизированного подбора составляют 8–12 часов на доступных вычислительных мощностях (процессор Intel Core i7-11370H) при последовательном выполнении расчётов.

Нейросетевой подход требует предварительной генерации обучающего датасета. В данной работе она включает создание 500 блоков данных, то есть 7500 запусков микроструктурной модели, и занимает около 24 часов. При этом обучение и инференс при использовании графического процессора NVIDIA RTX 3050 Mobile выполняются существенно быстрее генерации данных и не нуждаются в дополнительных запусках микроструктурной модели. Ручной подбор, как правило, требует меньшего числа запусков модели, однако его продолжительность зависит от опыта исследователя, выбранной последовательности пробных расчётов и критериев остановки. Поэтому при ручном подборе корректнее говорить не о фиксированном числе запусков, а о сопоставимых временных затратах при меньшей воспроизводимости процедуры.

Таким образом, основные вычислительные затраты в рассматриваемой задаче определяется временем работы микроструктурной модели, а не временем самого алгоритма оптимизации. Значительное ускорение может быть достигнуто за счёт распараллеливания вычислений, в частности, одновременного выполнения 15 расчётов, необходимых для одной оценки *fitness*. Альтернативный подход заключается в замене микроструктурной модели нейросетевой аппроксимацией, обученной на её данных; в этом случае процедура последующего подбора параметров может быть ускорена на порядки.

5. Заключение

В работе рассмотрены три автоматизированных подхода к подбору материальных констант модели эффекта стабилизации мартенсита: метод Нелдера–Мида, генетический алгоритм и нейросеть с архитектурой Deep Sets. Для сплава $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ метод Нелдера–Мида и генетический алгоритм дают наилучшее количественное соответствие экспериментальным данным и превосходят ручную калибровку по значению функции невязки. Для сплава $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ эти методы обеспечивают в основном качественное соответствие и показывают, что участвующий в расчётах набор подобранных параметров недостаточен для столь же точного количественного описания.

Нейросетевой подход может использоваться для подбора материальных констант, однако в рассматриваемой задаче, где варьируются только три параметра, классические оптимизационные методы оказываются эффективнее: они дают меньшие значения функции невязки и более устойчивый результат. Преимущество нейросетевого подхода может проявиться при увеличении числа подбираемых констант, когда стоимость перебора и локальной оптимизации существенно возрастает.

В целом автоматизированный подбор констант является целесообразным: он делает процедуру воспроизводимой, снижает зависимость результата от исследователя и позволяет получить точность не хуже, чем при ручной настройке. При этом выявленная неединственность наборов констант и расхождение для отдельных экспериментальных режимов показывают, что дальнейшее развитие модели должно связываться с уточнением её эволюционных уравнений и расширением экспериментальной базы для идентификации параметров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского государственного университета, проект 116636233.

Литература

1. Tadaki T., Otsuka K., Shimizu K. Shape Memory Alloys // Annual Review of Materials Science. 1988. Vol. 18. P. 25–45. DOI: 10.1146/annurev.ms.18.080188.000325
2. Otsuka K., Wayman C.M. Shape Memory Materials. Cambridge University Press, 1999. 284 p.
3. Kustov S., Golyandin S., Sapozhnikov K., Cesari E., Van Humbeeck J., De Batist R. Influence of martensite stabilization on the low-temperature non-linear anelasticity in Cu-Zn-Al shape memory alloys // Acta Materialia. 2002. Vol. 50. P. 3023–3044. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00131-3
4. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J. Pinning-induced stabilization of martensite: Part II. Kinetic stabilization in Cu-Zn-Al alloy due to pinning of moving interfaces // Acta Materialia. 2004. Vol. 52, no. 10. P. 3083–3096. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.03.010
5. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J. Chemical and mechanical stabilization of martensite // Acta Materialia. 2004. Vol. 52. P. 4547–4559. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.06.012
6. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J. Pinning-induced stabilization of martensite: Part I. Stabilization due to static pinning of interfaces // Acta Materialia. 2004. Vol. 52, no. 10. P. 3075–3081. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.03.009
7. Kustov S., Morin M., Cesari E. On the instantaneous stabilization in Cu-Al-Be β'_1 martensite // Scripta Materialia. 2004. Vol. 50, no. 2. P. 219–224. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.09.012
8. Kustov S., Pons J., Cesari E., Morin M., Van Humbeeck J. Athermal stabilization of Cu-Al-Be β'_1 martensite due to plastic deformation and heat treatment // Materials Science and Engineering: A. 2004. Vol. 373, no. 1/2. P. 328–338. DOI: 10.1016/j.msea.2004.02.001
9. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J., Morin M. Stabilization and hyperstabilization of Cu-Al-Be β'_1 martensite by thermal treatment and plastic deformation // Materials Science and Engineering: A. 2004. Vol. 378, no. 1/2. P. 283–288. DOI: 10.1016/j.msea.2003.10.352
10. Heczko O., Vronka M., Veřtát P., Rameš M., Onderková K., Kopecký V., Krátká P., Ge Y. Mechanical Stabilization of Martensite in Cu–Ni–Al Single Crystal and Unconventional Way to Detect It // Shape Memory and Superelasticity. 2018. Vol. 4, no. 1. P. 77–84. DOI: 10.1007/s40830-018-0164-1
11. Vronka M., Straka L., Seiner H., Karlík M., Heczko O. Mechanical Stabilization of Martensite: Comparison of Ni-Mn-Ga and Cu-Ni-Al Shape Memory Single Crystals // Acta Physica Polonica A. 2018. Vol. 134, no. 3. P. 627–630. DOI: 10.12693/APhysPolA.134.627
12. Picornell C., Pons J., Cesari E. Stabilisation of martensite by applying compressive stress in Cu-Al-Ni single crystals // Acta Materialia. 2001. Vol. 49, no. 20. P. 4221–4230. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00308-1

13. Мовчан А.А., Казарина С.А., Сильченко А.Л. Влияние неупругих деформаций на температуру начала обратного термоупругого превращения в сплавах с памятью формы. Часть 1. Анализ экспериментальных данных // Механика композиционных материалов и конструкций. 2018. Т. 24, № 3. С. 362–376. DOI: 10.33113/mkmmk.ras.2018.24.03.362_376.04
14. Chernenko V.A., Pons J., Cesari E., Zaslachuk I.K. Transformation behaviour and martensite stabilization in the ferromagnetic Co–Ni–Ga Heusler alloy // Scripta Materialia. 2004. Vol. 50, no. 2. P. 225–229. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.09.024
15. Kadletz P.M., Krooß P., Chumlyakov Y.I., Gutmann M.J., Schmahl W.W., Maier H.J., Niendorf T. Martensite stabilization in shape memory alloys – Experimental evidence for short-range ordering // Materials Letters. 2015. Vol. 159. P. 16–19. DOI: 10.1016/j.matlet.2015.06.048
16. Bakhtiari S., Li Y., Sarkar S., Yang H., Cui L., Liu Y. Deformation induced martensite stabilization of NiTi in constrained composite systems // Materials Science and Engineering: A. 2022. Vol. 857. P. 144128. DOI: 10.1016/j.msea.2022.144128
17. Lin H.C., Wu S.K., Chou T.S., Kao H.P. The effects of cold rolling on the martensitic transformation of an equiatomic TiNi alloy // Acta Metallurgica et Materialia. 1991. Vol. 39, no. 9. P. 2069–2080. DOI: 10.1016/0956-7151(91)90177-3
18. Piao M., Otsuka K., Miyazaki S., Horikawa H. Mechanisms of the A_s temperature increase by pre-deformation in thermoelastic alloys // Materials Transactions, JIM. 1993. Vol. 34, no. 10. P. 919–929. DOI: 10.2320/matertrans1989.34.919
19. Liu Y., Favier D. Stabilisation of martensite due to shear deformation via variant reorientation in polycrystalline NiTi // Acta Materialia. 2000. Vol. 48. P. 3489–3499. DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00129-4
20. Liu Y., McCormick P.G. Thermodynamic analysis of the martensitic transformation in NiTi—I. Effect of heat treatment on transformation behaviour // Acta Metallurgica et Materialia. 1994. Vol. 42, no. 7. P. 2401–2406. DOI: 10.1016/0956-7151(94)90318-2
21. Liu Y., Tan G.S. Effect of deformation by stress-induced martensitic transformation on the transformation behaviour of NiTi // Intermetallics. 2000. Vol. 8. P. 67–75. DOI: 10.1016/S0966-9795(99)00079-5
22. Tan G., Liu Y. Comparative study of deformation-induced martensite stabilization via martensite reorientation and stress-induced martensitic transformation in NiTi // Intermetallics. 2004. Vol. 12, no. 4. P. 373–381. DOI: 10.1016/j.intermet.2003.11.008
23. Liu Y. Mechanistic simulation of deformation-induced martensite stabilisation // Materials Science and Engineering: A. 2004. Vol. 378. P. 459–464. DOI: 10.1016/j.msea.2003.10.339
24. Liu Y., Tan G., Miyazaki S. Deformation-induced martensite stabilisation in [100] single-crystalline Ni–Ti // Materials Science and Engineering: A. 2006. Vol. 438–440. P. 612–616. DOI: 10.1016/j.msea.2006.02.130
25. Belyaev S., Resnina N., Iaparova E., Ivanova A., Rakhimov T., Andreev V. Influence of chemical composition of NiTi alloy on the martensite stabilization effect // Journal of Alloys and Compounds. 2019. Vol. 787. P. 1365–1371. DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.01.326
26. Belyaev S., Resnina N., Rakhimov T., Andreev V. Martensite stabilisation effect in Ni-rich NiTi shape memory alloy with different structure and martensitic transformations // Sensors and Actuators A: Physical. 2020. Vol. 305. 111911. DOI: 10.1016/j.sna.2020.111911
27. Belyaev S., Resnina N., Ivanova A., Ponikarova I., Iaparova E. Martensite Stabilization Effect in the Ni₅₀Ti₅₀ Alloy After Preliminary Deformation by Cooling Under Constant Stress // Shape Memory and Superelasticity. 2020. Vol. 6. P. 223–231. DOI: 10.1007/s40830-020-00282-2
28. Belyaev S., Resnina N., Ponikarova I., Iaparova E., Rakhimov T., Ivanova A., Tabachkova N., Andreev V. Damage of the martensite interfaces as the mechanism of the martensite stabilization effect in the NiTi shape memory alloys // Journal of Alloys and Compounds. 2022. Vol. 921. 166189. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.166189
29. Favier D., Liu Y. Restoration by rapid overheating of thermally stabilised martensite of NiTi shape memory alloys // Journal of Alloys and Compounds. 2000. Vol. 297. P. 114–121. DOI: 10.1016/S0925-8388(99)00576-9
30. Zheng Y.F., Zhao L.C., Ye H.Q. HREM studies of twin boundary structure in deformed martensite in the cold-rolled TiNi shape memory alloy // Materials Science and Engineering: A. 2001. Vol. 297. P. 185–196. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01222-3
31. Liu Y., Xie Z., Humbeeck J.V., Delaey L., Liu Y. On the deformation of the twinned domain in NiTi shape memory alloys // Philosophical Magazine A. 2000. Vol. 80, no. 8. P. 1935–1953. DOI: 10.1080/01418610008219095
32. Ortín J., Planes A. Thermodynamics of thermoelastic martensitic transformations // Acta Metallurgica. 1989. Vol. 37. P. 1433–1441. DOI: 10.1016/0001-6160(89)90175-2
33. Wollants P., Roos J.R., Delaey L. Thermally- and stress-induced thermoelastic martensitic transformations in the reference frame of equilibrium thermodynamics // Progress in Materials Science. 1993. Vol. 37. P. 227–288. DOI: 10.1016/0079-6425(93)90005-6
34. Salzbrenner R.J., Cohen M. On the thermodynamics of thermoelastic martensitic transformations // Acta Metallurgica. 1979. Vol. 27, no. 5. P. 739–748. DOI: 10.1016/0001-6160(79)90107-X
35. Мовчан А.А., Казарина С.А., Сильченко А.Л. Влияние неупругих деформаций на температуру начала обратного термоупругого превращения в сплавах с памятью формы. Часть 2. Термодинамическая модель // Механика композиционных материалов и конструкций. 2019. Т. 25, № 1. С. 3–18. DOI: 10.33113/mkmmk.ras.2019.25.01.003_018.01
36. Беляев Ф.С., Волков А.Е., Волкова Н.А., Вуколов Е.А., Евард М.Е., Ребров Т.В. Моделирование эффекта стабилизации мартенсита в никелиде титана после деформации в мартенситном состоянии // Механика композиционных материалов и конструкций. 2023. Т. 29, № 4. С. 470–482. DOI: 10.33113/mkmmk.ras.2023.29.04.04
37. Volkov A.E., Belyaev F.S., Volkova N.A., Vukolov E.A., Evard M.E., Rebrov T.V. The effect of martensite stabilization in titanium nickelide after various methods of pre-deformation: simulation with a single set of constants // Materials Physics and Mechanics. 2024. Vol. 52, no. 4. P. 91–99. DOI: 10.18149/MPM.5242024_9

38. Ребров Т.В., Волков А.Е., Вуколов Е.А., Беляев Ф.С., Волкова Н.А., Евард М.Е. Эффект стабилизации мартенсита в никелиде титана после предварительной деформации путём охлаждения под нагрузкой в неполном интервале превращения // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2024. № 6. С. 113–122. DOI: 10.15593/perm.mech/2024.6.10
39. Belyaev F., Evard M., Volkov A., Volkova N.A. A Microstructural Model of SMA with Microplastic Deformation and Defects Accumulation: Application to Thermocyclic Loading // Materials Today: Proceedings. 2015. Vol. 2. P. S583–S587. DOI: 10.1016/j.matpr.2015.07.352
40. Nelder J.A., Mead R. A Simplex Method for Function Minimization // The Computer Journal. 1965. Vol. 7, no. 4. P. 308–313. DOI: 10.1093/comjnl/7.4.308
41. Иванов А.М., Беляев Ф.С., Волков А.Е., Беляев С.П., Реснина Н.Н. Применение метода Нелдера-Мида для оптимизации выбора констант модели Лихачёва-Волкова // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9, № 4. С. 693–704. DOI: 10.21638/spbu01.2022.411
42. Tutkun N. Parameter estimation in mathematical models using the real coded genetic algorithms // Expert Systems with Applications. 2009. Vol. 36. P. 3342–3345. DOI: 10.1016/j.eswa.2008.01.060
43. Liu S., Butler D., Brazier R., Heathwaite L., Khu S.-T. Using genetic algorithms to calibrate a water quality model // Science of the Total Environment. 2007. Vol. 374. P. 260–272. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2006.12.042
44. Robson J.D., Armstrong D., Cordell J., Pope D., Flint T.F. Calibration of constitutive models using genetic algorithms // Mechanics of Materials. 2024. Vol. 189. P. 104881. DOI: 10.1016/j.mechmat.2023.104881
45. Meißner P., Watschke H., Winter J., Vietor T. Artificial Neural Networks-Based Material Parameter Identification for Numerical Simulations of Additively Manufactured Parts by Material Extrusion // Polymers. 2020. Vol. 12, no. 12. P. 2949. DOI: 10.3390/polym12122949
46. Kaup A., Lenzen N., Altay O. Neural Network Parameter Identification Based Constitutive Modeling of Superelastic Shape Memory Alloys // PAMM. 2021. Vol. 21, no. 1. DOI: 10.1002/pamm.202100251
47. Lenzen N., Klinkel S., Altay O. Parameter identification and modeling of superelastic shape memory alloy wires subjected to dynamic loads // 10th ECCOMAS Thematic Conference on Smart Structures and Materials. 2023. P. 1768–1777. DOI: 10.7712/150123.9947.444214
48. Tanyu D.N., Michel I., Rademacher A., Kuhnert J., Maass P. Parameter identification by deep learning of a material model for granular media // GEM - International Journal on Geomathematics. 2024. Vol. 15. P. 13. DOI: 10.1007/s13137-024-00253-0
49. Коробов Н.М. Теоретико-числовые методы в приближённом анализе. М.: Изд-во МЦНМО, 2014. 285 с.
50. Zaheer M., Kottur S., Ravanbakhsh S., Poczos B., Salakhutdinov R., Smola A.J. Deep Sets. 2018. arXiv:1703.06114. DOI: 10.48550/arXiv.1703.06114
51. Hendrycks D., Gimpel K. Gaussian Error Linear Units (GELUs). 2016. arXiv:1606.08415. DOI: 10.48550/arXiv.1606.08415
52. Damadi S., Moharrer G., Cham M. The Backpropagation algorithm for a math student. 2023. arXiv:2301.09977. DOI: 10.48550/arXiv.2301.09977

Сведения об авторах:

Ребров Тимофей Викторович (корр.), асп., Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ), 199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9; e-mail: st063189@student.spbu.ru; ORCID: 0000-0001-9878-8227

Беляев Фёдор Степанович, кфмн, доц., СПбГУ; e-mail: belyaev_fs@mail.ru; ORCID: 0000-0003-0792-9931

Волков Александр Евгеньевич, дфмн, проф., СПбГУ; e-mail: a.volkov@spbu.ru; ORCID: 0000-0001-5035-7970

Вуколов Егор Александрович, б/с, нс, СПбГУ; e-mail: e.a.vukolov@yandex.ru; ORCID: 0000-0001-9439-209X

Евард Маргарита Евгеньевна, кфмн, доц., СПбГУ; e-mail: m.evard@spbu.ru; ORCID: 0000-0003-0550-688X

Research article

Methods for identification of material constants associated with the martensite stabilization effect in shape memory alloy models

T.V. Rebrov¹, F.S. Belyaev^{1,2}, A.E. Volkov¹, E.A. Vukolov¹, M.E. Evard¹

¹ Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russian Federation

² Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, Saint Petersburg, Russian Federation

The martensite stabilization effect significantly influences the thermomechanical response of shape memory alloys and must be properly taken into account in numerical modeling. In our previous studies, to describe this effect in TiNi alloys we developed a model using the microstructural approach. The foundation of the model was the hypothesis of

damage accumulation at inter-martensitic boundaries. In this work, four approaches to the identification of material constants of this model are considered: manual fitting, the deterministic Nelder–Mead method, a stochastic genetic algorithm, and a neural network approach based on the Deep Sets architecture. The study uses the results of experiments for the $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{50}$ and $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ titanium nickelide alloys reported in the literature. These experiments reproduce three characteristic modes of applying preliminary deformation: tensile deformation in the martensitic state, cooling under constant load, and stress-induced martensite transformation. The parameter identification procedure aims to minimize the discrepancy function measuring the difference between the calculated and experimentally observed shifts in the reverse martensitic transformation temperature. A comparison of the accuracy and computational efficiency of the applied methods was carried out for both alloys. The results show that the Nelder–Mead method and the genetic algorithm provide a comparable quality of the experimental data approximation at moderate computational costs and relatively simple parameter setting. The neural network approach demonstrates less accurate agreement between the results of numerical simulation and experiments but provides fast inference after training; however, it requires pre-generation of large training datasets and exhibits increased sensitivity to the initial training conditions. The obtained results confirm the applicability of different methods of automated parameter identification for models of shape memory alloys.

Keywords: shape memory alloys, martensite stabilization effect, titanium nickelide, Nelder–Mead method, genetic algorithm, neural network

Received: 03.04.2026 / **Published online:** 05.08.2026

Acknowledgements

This work was supported by the Saint Petersburg State University (project No. 116636233).

References

1. Tadaki T., Otsuka K., Shimizu K. Shape Memory Alloys. *Annual Review of Materials Science*. 1988. Vol. 18. P. 25–45. DOI: 10.1146/annurev.ms.18.080188.000325
2. Otsuka K., Wayman C.M. *Shape Memory Materials*. Cambridge University Press, 1999. 284 p.
3. Kustov S., Golyandin S., Sapozhnikov K., Cesari E., Van Humbeeck J., De Batist R. Influence of martensite stabilization on the low-temperature non-linear anelasticity in Cu–Zn–Al shape memory alloys. *Acta Materialia*. 2002. Vol. 50. P. 3023–3044. DOI: 10.1016/S1359-6454(02)00131-3
4. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J. Pinning-induced stabilization of martensite: Part II. Kinetic stabilization in Cu–Zn–Al alloy due to pinning of moving interfaces. *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, no. 10. P. 3083–3096. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.03.010
5. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J. Chemical and mechanical stabilization of martensite. *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52. P. 4547–4559. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.06.012
6. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J. Pinning-induced stabilization of martensite: Part I. Stabilization due to static pinning of interfaces. *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, no. 10. P. 3075–3081. DOI: 10.1016/j.actamat.2004.03.009
7. Kustov S., Morin M., Cesari E. On the instantaneous stabilization in Cu–Al–Be β'_1 martensite. *Scripta Materialia*. 2004. Vol. 50, no. 2. P. 219–224. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.09.012
8. Kustov S., Pons J., Cesari E., Morin M., Van Humbeeck J. Athermal stabilization of Cu–Al–Be β'_1 martensite due to plastic deformation and heat treatment. *Materials Science and Engineering: A*. 2004. Vol. 373, no. 1/2. P. 328–338. DOI: 10.1016/j.msea.2004.02.001
9. Kustov S., Pons J., Cesari E., Van Humbeeck J., Morin M. Stabilization and hyperstabilization of Cu–Al–Be β'_1 martensite by thermal treatment and plastic deformation. *Materials Science and Engineering: A*. 2004. Vol. 378, no. 1/2. P. 283–288. DOI: 10.1016/j.msea.2003.10.352
10. Heczko O., Vronka M., Veřtát P., Rameš M., Onderková K., Kopecký V., Krátká P., Ge Y. Mechanical Stabilization of Martensite in Cu–Ni–Al Single Crystal and Unconventional Way to Detect It. *Shape Memory and Superelasticity*. 2018. Vol. 4, no. 1. P. 77–84. DOI: 10.1007/s40830-018-0164-1
11. Vronka M., Straka L., Seiner H., Karlík M., Heczko O. Mechanical Stabilization of Martensite: Comparison of Ni–Mn–Ga and Cu–Ni–Al Shape Memory Single Crystals. *Acta Physica Polonica A*. 2018. Vol. 134, no. 3. P. 627–630. DOI: 10.12693/APhysPolA.134.627
12. Picornell C., Pons J., Cesari E. Stabilisation of martensite by applying compressive stress in Cu–Al–Ni single crystals. *Acta Materialia*. 2001. Vol. 49, no. 20. P. 4221–4230. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00308-1
13. Movchan A.A., Kazarina S.A., Silchenko A.L. The influence of inelastic deformations on the reverse thermoelastic transformation start temperature in shape memory alloys. Part 1. Experimental data analysis. *Mechanics of Composite Materials and Structures*. 2018. Vol. 24, no. 3. P. 362–376. DOI: 10.33113/mkmmk.ras.2018.24.03.362_376.04
14. Chernenko V.A., Pons J., Cesari E., Zashchuk I.K. Transformation behaviour and martensite stabilization in the ferromagnetic Co–Ni–Ga Heusler alloy. *Scripta Materialia*. 2004. Vol. 50, no. 2. P. 225–229. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2003.09.024

15. Kadletz P.M., Krooß P., Chumlyakov Y.I., Gutmann M.J., Schmahl W.W., Maier H.J., Niendorf T. Martensite stabilization in shape memory alloys – Experimental evidence for short-range ordering. *Materials Letters*. 2015. Vol. 159. P. 16–19. DOI: 10.1016/j.matlet.2015.06.048
16. Bakhtiari S., Li Y., Sarkar S., Yang H., Cui L., Liu Y. Deformation induced martensite stabilization of NiTi in constrained composite systems. *Materials Science and Engineering: A*. 2022. Vol. 857. P. 144128. DOI: 10.1016/j.msea.2022.144128
17. Lin H.C., Wu S.K., Chou T.S., Kao H.P. The effects of cold rolling on the martensitic transformation of an equiatomic TiNi alloy. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1991. Vol. 39, no. 9. P. 2069–2080. DOI: 10.1016/0956-7151(91)90177-3
18. Piao M., Otsuka K., Miyazaki S., Horikawa H. Mechanisms of the A_s temperature increase by pre-deformation in thermoelastic alloys. *Materials Transactions, JIM*. 1993. Vol. 34, no. 10. P. 919–929. DOI: 10.2320/matertrans1989.34.919
19. Liu Y., Favier D. Stabilisation of martensite due to shear deformation via variant reorientation in polycrystalline NiTi. *Acta Materialia*. 2000. Vol. 48. P. 3489–3499. DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00129-4
20. Liu Y., McCormick P.G. Thermodynamic analysis of the martensitic transformation in NiTi—I. Effect of heat treatment on transformation behaviour. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1994. Vol. 42, no. 7. P. 2401–2406. DOI: 10.1016/0956-7151(94)90318-2
21. Liu Y., Tan G.S. Effect of deformation by stress-induced martensitic transformation on the transformation behaviour of NiTi. *Intermetallics*. 2000. Vol. 8. P. 67–75. DOI: 10.1016/S0966-9795(99)00079-5
22. Tan G., Liu Y. Comparative study of deformation-induced martensite stabilization via martensite reorientation and stress-induced martensitic transformation in NiTi. *Intermetallics*. 2004. Vol. 12, no. 4. P. 373–381. DOI: 10.1016/j.intermet.2003.11.008
23. Liu Y. Mechanistic simulation of deformation-induced martensite stabilisation. *Materials Science and Engineering: A*. 2004. Vol. 378. P. 459–464. DOI: 10.1016/j.msea.2003.10.339
24. Liu Y., Tan G., Miyazaki S. Deformation-induced martensite stabilisation in [100] single-crystalline Ni–Ti. *Materials Science and Engineering: A*. 2006. Vol. 438–440. P. 612–616. DOI: 10.1016/j.msea.2006.02.130
25. Belyaev S., Resnina N., Iaparova E., Ivanova A., Rakhimov T., Andreev V. Influence of chemical composition of NiTi alloy on the martensite stabilization effect. *Journal of Alloys and Compounds*. 2019. Vol. 787. P. 1365–1371. DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.01.326
26. Belyaev S., Resnina N., Rakhimov T., Andreev V. Martensite stabilisation effect in Ni-rich NiTi shape memory alloy with different structure and martensitic transformations. *Sensors and Actuators A: Physical*. 2020. Vol. 305. 111911. DOI: 10.1016/j.sna.2020.111911
27. Belyaev S., Resnina N., Ivanova A., Ponikarova I., Iaparova E. Martensite Stabilization Effect in the Ni₅₀Ti₅₀ Alloy After Preliminary Deformation by Cooling Under Constant Stress. *Shape Memory and Superelasticity*. 2020. Vol. 6. P. 223–231. DOI: 10.1007/s40830-020-00282-2
28. Belyaev S., Resnina N., Ponikarova I., Iaparova E., Rakhimov T., Ivanova A., Tabachkova N., Andreev V. Damage of the martensite interfaces as the mechanism of the martensite stabilization effect in the NiTi shape memory alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2022. Vol. 921. 166189. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.166189
29. Favier D., Liu Y. Restoration by rapid overheating of thermally stabilised martensite of NiTi shape memory alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2000. Vol. 297. P. 114–121. DOI: 10.1016/S0925-8388(99)00576-9
30. Zheng Y.F., Zhao L.C., Ye H.Q. HREM studies of twin boundary structure in deformed martensite in the cold-rolled TiNi shape memory alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2001. Vol. 297. P. 185–196. DOI: 10.1016/S0921-5093(00)01222-3
31. Liu Y., Xie Z., Humbeeck J.V., Delaey L., Liu Y. On the deformation of the twinned domain in NiTi shape memory alloys. *Philosophical Magazine A*. 2000. Vol. 80, no. 8. P. 1935–1953. DOI: 10.1080/01418610008219095
32. Ortín J., Planes A. Thermodynamics of thermoelastic martensitic transformations. *Acta Metallurgica*. 1989. Vol. 37. P. 1433–1441. DOI: 10.1016/0001-6160(89)90175-2
33. Wollants P., Roos J.R., Delaey L. Thermally- and stress-induced thermoelastic martensitic transformations in the reference frame of equilibrium thermodynamics. *Progress in Materials Science*. 1993. Vol. 37. P. 227–288. DOI: 10.1016/0079-6425(93)90005-6
34. Salzbrenner R.J., Cohen M. On the thermodynamics of thermoelastic martensitic transformations. *Acta Metallurgica*. 1979. Vol. 27, no. 5. P. 739–748. DOI: 10.1016/0001-6160(79)90107-X
35. Movchan A.A., Kazarina S.A., Silchenko A.L. The influence of inelastic deformations on the reverse thermoelastic transformation start temperature in shape memory alloys. Part 2. Thermodynamic model. *Mechanics of Composite Materials and Structures*. 2019. Vol. 25, no. 1. P. 3–18. DOI: 10.33113/mkmk.ras.2019.25.01.003_018.01
36. Belyaev F.S., Volkov A.E., Volkova N.A., Vukolov E.A., Evard M.E., Rebrov T.V. Simulation of the effect of martensite stabilization in titanium nickelide after deformation in the martensitic state. *Mechanics of Composite Materials and Structures*. 2023. Vol. 29, no. 4. P. 470–482. (In Russian). DOI: 10.33113/mkmk.ras.2023.29.04.04
37. Volkov A.E., Belyaev F.S., Volkova N.A., Vukolov E.A., Evard M.E., Rebrov T.V. The effect of martensite stabilization in titanium nickelide after various methods of pre-deformation: simulation with a single set of constants. *Materials Physics and Mechanics*. 2024. Vol. 52, no. 4. P. 91–99. DOI: 10.18149/MPM.5242024_9
38. Rebrov T.V., Volkov A.E., Vukolov E.A., Belyaev F.S., Volkova N.A., Evard M.E. The martensite stabilization effect in titanium nickelide after preliminary deformation by cooling under stress in an incomplete transformation interval. *Bulletin of the Perm National Research Polytechnic University. Mechanics*. 2024. No. 6. P. 113–122. (In Russian). DOI: 10.15593/perm.mech/2024.6.10

39. *Belyaev F., Evard M., Volkov A., Volkova N.A.* A Microstructural Model of SMA with Microplastic Deformation and Defects Accumulation: Application to Thermocyclic Loading. *Materials Today: Proceedings*. 2015. Vol. 2. P. S583–S587. DOI: 10.1016/j.matpr.2015.07.352
40. *Nelder J.A., Mead R.* A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal*. 1965. Vol. 7, no. 4. P. 308–313. DOI: 10.1093/comjnl/7.4.308
41. *Ivanov A.M., Belyaev F.S., Volkov A.E., Belyaev S.P., Resnina N.N.* Application of the Nelder–Mead Method to Optimize the Way for Selection of the Likhachev–Volkov Model Constants. *Vestnik St. Petersburg University, Mathematics*. 2022. Vol. 55. P. 453–460. DOI: 10.1134/S1063454122040112
42. *Tutkun N.* Parameter estimation in mathematical models using the real coded genetic algorithms. *Expert Systems with Applications*. 2009. Vol. 36. P. 3342–3345. DOI: 10.1016/j.eswa.2008.01.060
43. *Liu S., Butler D., Brazier R., Heathwaite L., Khu S.-T.* Using genetic algorithms to calibrate a water quality model. *Science of the Total Environment*. 2007. Vol. 374. P. 260–272. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2006.12.042
44. *Robson J.D., Armstrong D., Cordell J., Pope D., Flint T.F.* Calibration of constitutive models using genetic algorithms. *Mechanics of Materials*. 2024. Vol. 189. P. 104881. DOI: 10.1016/j.mechmat.2023.104881
45. *Meißner P., Watschke H., Winter J., Vietor T.* Artificial Neural Networks-Based Material Parameter Identification for Numerical Simulations of Additively Manufactured Parts by Material Extrusion. *Polymers*. 2020. Vol. 12, no. 12. P. 2949. DOI: 10.3390/polym12122949
46. *Kaup A., Lenzen N., Altay O.* Neural Network Parameter Identification Based Constitutive Modeling of Superelastic Shape Memory Alloys. *PAMM*. 2021. Vol. 21, no. 1. DOI: 10.1002/pamm.202100251
47. *Lenzen N., Klinkel S., Altay O.* Parameter identification and modeling of superelastic shape memory alloy wires subjected to dynamic loads. 10th ECCOMAS Thematic Conference on Smart Structures and Materials. 2023. P. 1768–1777. DOI: 10.7712/150123.9947.444214
48. *Tanyu D.N., Michel I., Rademacher A., Kuhnert J., Maass P.* Parameter identification by deep learning of a material model for granular media. *GEM - International Journal on Geomathematics*. 2024. Vol. 15. P. 13. DOI: 10.1007/s13137-024-00253-0
49. *Korobov N.M.* Teoretiko-chislovyye metody v priblizhennoy analize. Moscow: The publishing house of the ICNMO, 2014. 285 p.
50. *Zaheer M., Kottur S., Ravanbakhsh S., Poczos B., Salakhutdinov R., Smola A.J.* Deep Sets. 2018. arXiv:1703.06114. DOI: 10.48550/arXiv.1703.06114
51. *Hendrycks D., Gimpel K.* Gaussian Error Linear Units (GELUs). 2016. arXiv:1606.08415. DOI: 10.48550/arXiv.1606.08415
52. *Damadi S., Moharrer G., Cham M.* The Backpropagation algorithm for a math student. 2023. arXiv:2301.09977. DOI: 10.48550/arXiv.2301.09977