

Прогнозирование свойств порошковых материалов

Ясницкий Л.Н.

Традиционно в технических науках широко применяются детерминированные математические модели, основанные на явных законах и закономерностях предметных областей. Однако в последнее время для решения все большего количества проблем такой подход к их решению, как правило, не дает желаемых результатов. Это, в первую очередь, явления и процессы, характерные для современных нанотехнологий, для которых не годятся гипотезы сплошного континуума и бесконечно малого объема, сохраняющего свойства макросреды. Как показывает анализ литературы [1], не смотря на многообразие детерминированных моделей, описывающих процессы порошковой металлургии, эти модели, как правило, не учитывают форму и размеры частиц, распределение дефектов и примесей, дефекты формования, свойства поверхностей раздела, распределение пор и зерен по размерам и т.д. Поэтому точное предсказание поведения системы, например при спекании, пока не возможно. На практике мы постоянно сталкиваемся с более сложными объектами, чем могут описать современные детерминированные модели. Их совершенствование не успевает за потребностями практики потому, что такие модели не могут в принципе охватить все тонкости усложняющихся технологических процессов. Детерминированные модели в силу самой своей природы не могут учитывать все многообразие явлений, протекающих как на макро- так и на микроуровнях.

Настоящим проектом предпринимается попытка применения нового подхода к формированию математических моделей нанотехнологий, основанного на идеях и методах искусственного интеллекта.

Всегда считалось, что процесс открытия фундаментальных законов природы – это прерогатива исключительно человека. Всегда считалось, что построение математических моделей и их компьютерных реализаций – это высокоинтеллектуальная задача, требующая совместных усилий математиков, программистов и специалистов предметных областей, в которых выполняется моделирование. Однако в последнее время, в связи с успехами в области искусственного интеллекта, этот традиционный для человека вид его интеллектуальной деятельности, связанный с созданием самих математических моделей, активно перекладывается на компьютер. Компьютер теперь может сам открывать фундаментальные законы природы, выявлять связи и закономерности предметных областей и закладывать их в математические компьютерные модели. Причем, во многих случаях компьютер с этим справляется лучше, чем сам человек. Компьютер может выявлять и учитывать в создаваемых им моделях новые законы, закономерности и внутренние связи предметной области, никогда ранее неизвестные ученым и специалистам. В результате модели, создаваемые

компьютером, учитывают большее количество факторов, законов и закономерностей, влияющих на результат компьютерного моделирования. Это, естественно, улучшает качество и повышает эффективность математических компьютерных моделей.

Пермской научной школой искусственного интеллекта [2] накоплен богатый опыт создания и практического применения интеллектуальных информационных систем в самых разнообразных областях, таких как промышленность, медицина, бизнес, экономика, политология, социология, криминалистика и пр. Все наши математические компьютерные модели, как правило, создаются при помощи аппарата нейронных сетей, а те, в свою очередь, моделируют мозг человека. Благодаря этому, они наследуют от мозга уникальные свойства, такие как способность извлечения знаний из статистических данных, способность обобщения их в виде законов и закономерностей предметных областей, свойства интуиции [3], заимствованные ими от своего прототипа – мозга.

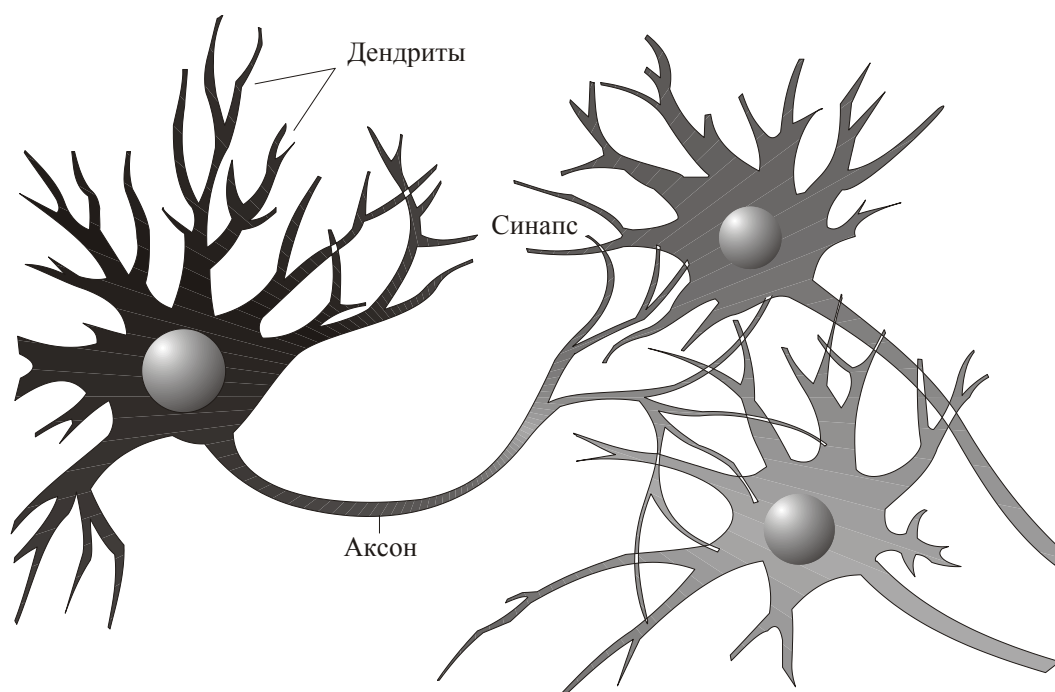


Рис.1. Нейроны человеческого мозга

Нейрокомпьютер (нейронная сеть), как и человеческий мозг, состоит из множества соединенных между собой элементарных ячеек – модельных нейронов, принцип действия которых во многом аналогичен принципу действия биологических нейронов (рис.1), из которых состоит мозг. Как и в мозге, нейроны нейрокомпьютера соединены между собой множеством проводов, через которые происходит обмен электрическими сигналами. Как и биологические нейроны, нейроны нейрокомпьютера могут переходить в возбужденное состояние, вырабатывая и посылая электрические сигналы другим нейронам, причем переход в возбужденное состояние каждого нейрона тем вероятнее, чем большее количество сигналов он получил от других нейронов.

Согласно нейрофизиологическим представлениям вся информация, хранящаяся в мозге, закодирована в виде матрицы сил синаптических связей – -- множества величин электропроводности проводников, соединяющих биологические нейроны, причем эти величины, по мере жизнедеятельности мозга, постоянно меняются, чем обеспечивается накопление и корректировка хранящейся в мозге информации. Этот механизм в нейрокомпьютере имитируется путем соответствующего изменения синаптических весовых коэффициентов, выполняющих роль электропроводности соединяющих нейроны проводников. Таким образом, как и в мозге, вся информация в нейрокомпьютере представляется и хранится в виде матрицы сил синаптических связей нейронов.

В отличие от обычного компьютера, нейрокомпьютер не программируется, а подобно человеку обучается. При этом происходит корректировка сил синаптических связей. Обучение проводится на обучающих примерах, содержащих информацию о моделируемой предметной области. Например, чтобы нейрокомпьютер «открыл» теорему Пифагора, надо нарисовать несколько различных прямоугольных треугольников, измерить длины их гипотенуз и катетов и передать эту информацию нейрокомпьютеру. Если измерения выполнены правильно и треугольников было достаточно много, то можно не сомневаться, что нейрокомпьютер повторит подвиг знаменитого геометра древности.

Поступая аналогичным образом, собирая информацию о соответствующих предметных областях, можно заново открыть закон Архимеда, законы Ньютона, уравнения Шредингера и Эйнштейна, все фундаментальные законы физики, химии, биологии, экономики и всех других наук.

Таким образом, нейрокомпьютерные и нейросетевые технологии, по существу, открывают принципиально новый подход к самой методике построения компьютерных математических моделей. Появилась возможность строить математические модели, которые сами извлекают закономерности предметной области, позволяют их эффективно использовать для решения широкого круга практических задач исходя из одного только эмпирического опыта – множества обучающих примеров. При этом не обязательно задумываться над законами физики, химии, биологии, экономики и т.д., компьютер их обнаруживает сам.

Появился новый способ получения научных знаний. Появился инструмент извлечения знаний из данных, инструмент, позволяющий выявлять ранее неизвестные и никогда не исследованные зависимости и закономерности и активно использовать их для решения практических задач.

В качестве примера рассмотрим процесс получения материалов методом порошковой металлургии. Этот прогрессивный технологический процесс в свое время позволил получить ряд материалов с уникальными свойствами, обеспечив решение многих стратегически важных технических задач. В настоящее время накоплено огромное количество экспериментальных данных по порошковым материалам, однако отсутствуют

математические модели, обобщающие эти данные, позволяющие выполнять точный прогноз свойств и характеристик материалов. Практически отсутствуют математические модели, позволяющие подбирать рецептуры и параметры технологического процесса для получения порошкового материала с заданными свойствами.

В табл.1 приведены данные экспериментов [4] по получению аустенитной хромоникелевой стали. Как видно из таблицы, свойства порошкового материала: плотность, прочность, относительное удлинение – зависят от химического состава стали и технологических параметров его получения: кратности прессования, давления прессования, температуры спекания.

Таблица 1

Механические свойства аустенитной хромоникелевой стали [4]

№ эксперимента	Марка	Хим. состав	Технология получения	ρ г/см ²	σ_B мПа	δ %
1	301-B	Cr – 17-19% Ni – 8-10% Si – 2-3% C – 0,08-0,2% Mn – до 2%	Однократное прессование: P1=650мПа и спекание, Tсп=1200°С, 45 мин в водороде.	5,59	180	8
2	– “–	– “–	Двукратное прессование: P1=650, P2=650мПа и спекание, Tсп=1200°С, 45 мин в водороде.	6,23	380	20
3	– “–	– “–	Однократное прессование: P1=650мПа и спекание, Tсп=1260°С, 45 мин в водороде.	5,9	280	15
4	– “–	– “–	Двукратное прессование: P1=650, P2=650мПа и спекание, Tсп=1260°С, 45 мин в водороде.	6,94	520	26
5	– “–	– “–	Двукратное прессование: P1=800, P2=800мПа и спекание, Tсп=1260°С, 45 мин в водороде.	6,79	610	32
6	316	C – 0,1% Cr – 16-18% Ni – 10-14% Mo Mn Si	Однократное прессование: P1=650мПа и спекание, Tсп=1200°С, 45 мин в водороде.	5,77	180	8
7	– “–	– “–	Двукратное прессование: P1=650, P2=650мПа и спекание, Tсп=1200°С, 45 мин в водороде.	6,37	330	18
8	– “–	– “–	Однократное прессование: P1=650мПа и спекание, Tсп=1260°С, 45 мин в водороде.	6,02	280	13
9	– “–	– “–	Двукратное прессование: P1=650, P2=650мПа и спекание, Tсп=1260°С, 45 мин в водороде.	6,6	430	20

10	– “–	– “–	Двукратное прессование: P1=800, P2=800мПа и спекание, Tсп=1260°C, 45 мин в водороде.	7	540	31,2
----	------	------	--	---	-----	------

Поэтому в качестве входных параметров нейронной сети примем следующие:

x_1 – марка стали. Для стали марки 301-В примем $x_1 = 1$, для стали марки 316 примем $x_1 = 2$.

x_2 – давление прессования P1.

x_3 – вторичное давление P2 при двукратном прессовании. В случае однократного прессования $x_3 = 0$.

x_4 – температура спекания.

В качестве выходных параметров нейросети примем:

y_1 – плотность стали ρ .

y_2 – предел прочности σ_B .

y_3 – относительное удлинение δ .

С использованием введенных обозначений и экспериментальных данных табл.1 была сформирована табл.2, содержащая множество примеров для обучения и тестирования нейросети:

Таблица 2

Множество примеров, характеризующих предметную область

№ примера	x_1 Марка стали	x_2 Давление прессования, мПа	x_3 Вторичное давление прессования, мПа	x_4 Температура спекания, °C	y_1 Плотность ρ , г/см ²	y_2 Предел прочности и σ_B , мПа	y_3 Относительное удлинение δ , %
1	1	650	0	1200	5,59	180	8
2	1	650	650	1200	6,23	380	20
3	1	650	0	1260	5,9	280	15
4	1	650	650	1260	6,94	520	26
5	1	800	800	1260	6,79	610	32
6	2	650	0	1200	5,77	180	8
7	2	650	650	1200	6,37	330	18
8	2	650	0	1260	6,02	280	13
9	2	650	650	1260	6,6	430	20
10	2	800	800	1260	7	540	31,2

Нейронная сеть, изображенная на рис. 2, созданная с помощью нейросимулятора [5], была обучена методом обратного распространения ошибки на девяти примерах табл. 2. Десятый пример этой таблицы был использован в качестве тестирующего. Результаты тестирования обученной нейросети приведены в табл. 3.

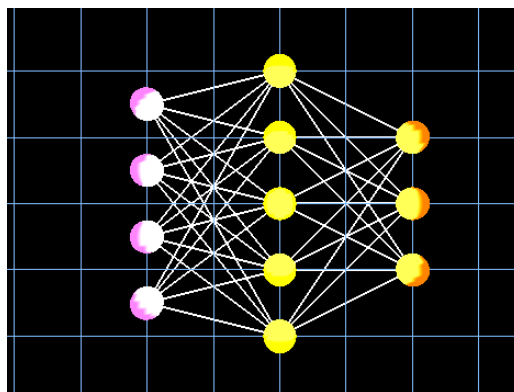


Рис. 2. Нейронная сеть персептронного типа, имеющая 4 входных нейрона и 3 выходных нейрона с линейными активационными функциями, 5 нейронов скрытого слоя с логарифмическими активационными функциями.

Таблица 3

Результаты тестирования нейронной сети

Результат	y_1 Плотность ρ , г/см ²	y_2 Предел прочности σ_B , МПа	y_3 Относительное удлинение δ , %
Эксперимент [4]	7	540	31,2
Прогноз сети	6,8	568,7	29,4
Погрешность	2,8 %	5,3 %	5,5 %

Выполненное исследование позволяет сделать следующий вывод.

Обучившись на девяти из десяти экспериментальных результатах, нейросеть смогла правильно (с погрешностью не более 5,5%) спрогнозировать результаты 10-го эксперимента. Это значит, что сеть, обучившись на экспериментальных данных, не смотря на их малое количество, смогла извлечь необходимые знания о моделируемой предметной области и теперь ее можно использовать в качестве математической модели этой предметной области. Как математическую модель ее можно использовать для прогнозирования свойств порошковых материалов в зависимости от их химического состава (марки стали) и параметров технологического процесса. С помощью нее можно построить номограммы, характеризующие закономерности процесса получения порошковых материалов.

Несколько таких номограмм построены на рис. 3-5. Они отражают

зависимость предела прочности порошкового материала σ_B от марки стали (химического состава), от первичного P1 и вторичного P2 давлений прессования и от температуры спекания Tсп.

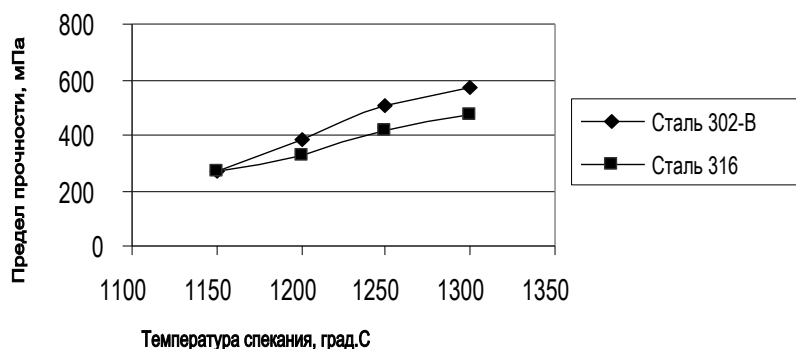


Рис. 3. Зависимость предела прочности σ_B от температуры спекания Tсп при двукратном прессовании P1=650, P2=650 МПа

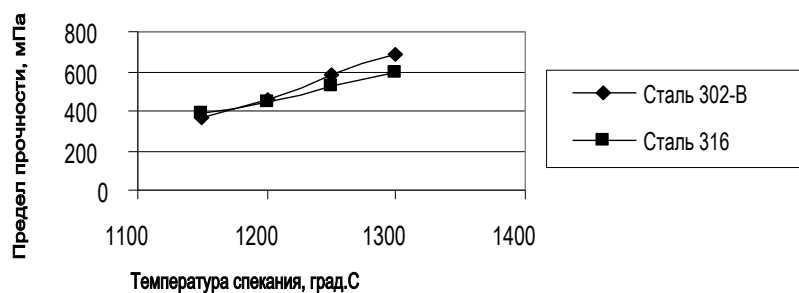


Рис. 4. Зависимость предела прочности σ_B от температуры спекания Tсп при двукратном прессовании P1=800, P2=800 МПа

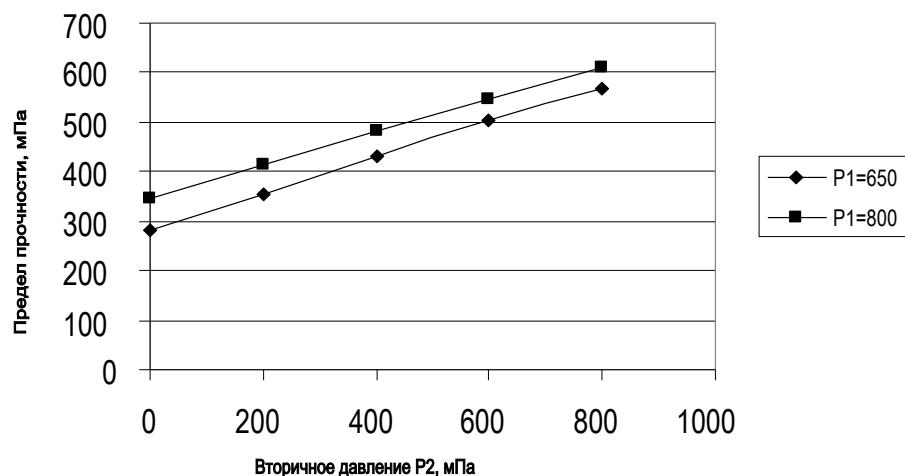


Рис. 5. Зависимость предела прочности σ_B от вторичного давления прессования P2 при двукратном прессовании. Материал сталь 302-B,

Температура спекания 1260°C

Заключение. В работе показана принципиальная возможность применения аппарата нейронных сетей для построения моделей, описывающих процессы порошковой технологии. Нейронная сеть обученная всего на девяти примерах экспериментальных данных, показала способность прогнозирования механических свойств новых материалов, предсказав результаты 10-го эксперимента с погрешностью, не превышающей 5,5 %. Нейронная сеть извлекла из экспериментальных данных знания, которые были использованы для построения номограмм, отражающих зависимости механических характеристик получаемых порошковых материалов от их химического состава (марок) и параметров порошковых технологий.

Представляется целесообразным построение более мощных нейросетевых математических моделей, включающих до 50-и входных и выходных параметров, обучаемых на сотнях и тысячах экспериментальных результатах. В частности, в качестве входных данных вместо указания марки материала можно вводить его полный химический состав. Тогда модель будет прогнозировать свойства порошковых материалов не только от параметров прессования и спекания, но и от процентного содержания того или иного химического компонента. С помощью таких компьютерных моделей можно будет подбирать не только технологический режим, но и нужный химический состав, обеспечивающий заданные свойства порошкового материала.

Кроме прогнозирования свойств порошковых материалов, подбора их рецептур и параметров порошкового процесса, нейросетевые математические модели могут быть полезны и в научных исследованиях. Они подскажут, в каком направлении следует двигаться исследователям для получения новых материалов с новыми уникальными свойствами.

Автор выражает благодарность академику В.Н.Анциферову за предоставленные материалы и полезные обсуждения.

Литература

1. Моделирование процессов спекания. Конференция, Бад-Гоннов, Германия, 26-28 ноября 1990 г. Modelling of sintering process: Conf., Bad Honnef, Germany, November 26-28, 1990 / German R.M. // Int/J/ Powder Met. – 1991. – 27, № 2. – P.177-178.
2. Пермская научная школа искусственного интеллекта и ее инновационные проекты / Л.Н.Ясницкий, В.В.Бондарь, С.Н.Бурдин и др.; под ред. Л.Н.Ясницкого. – Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. – 75 с.
3. Ясницкий Л.Н. Введение в искусственный интеллект. Издание 3. М.: Издательский центр «Академия», 2010. – 176 с.

4. Анциферов В.Н., Акименко В.Б. Спеченные легированные стали. – М.: Металлургия, 1983.
5. Черепанов Ф.М., Ясицкий Л.Н. Симулятор нейронных сетей «Нейросимулятор 1.0». // Свидетельство об отраслевой регистрации разработки №8756. Зарегистрировано в Отраслевом фонде алгоритмов и программ 12.07.2007.