



Optymalizacja procesu predykcji własności mechanicznych normalizowanych stali odpornych na korozję po obróbce walcowania

K. Meżyk^a, R. Honysz^b

^a Student Politechniki Śląskiej, Wydział Mechaniczny Technologiczny, Instytut Materiałów Inżynierskich i Biomedycznych

email: krzysztof.mezyk@gmail.com

^b Politechnika Śląska, Wydział Mechaniczny Technologiczny, Instytut Materiałów Inżynierskich i Biomedycznych, Zakład Inżynierii Materiałów Biomedycznych

email: rafal.honysz@polsl.pl

Streszczenie: W artykule omówiono zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do badań i predykcji wpływu pierwiastków chemicznych i parametrów obróbki cieplnej na własności mechaniczne stali odpornych na korozję, dodatkowo w celach ekonomicznych i ekologicznych optymalizowano sieć za pomocą algorytmu genetycznego. Optymalizacja pozwala skrócić czas poszukiwania najlepszej dostępnej sieci i zmniejsza ilość zmiennych wejściowych.

Abstract: The article discusses the use of artificial neural networks for research and prediction of the impact of chemical elements and heat treatment parameters on the mechanical properties of stainless steels, also for economic and ecological network optimized by genetic algorithm. Optimization can reduce the time of searching the best available network and reduces the number of input variables.

Słowa kluczowe: stal odporna na korozję, sztuczne sieci neuronowe, optymalizacja

1. WSTĘP

Jednym z głównych zadań inżyniera materiałowego jest dobór materiału inżynierskiego, który będzie spełniał wszystkie wymogi jemu stawiane. Składa się na to skład chemiczny danego materiału, jego struktura jak i procesy technologiczne, dzięki któremu uzyskuje się oczekiwaną strukturę. Dzięki prawidłowemu doborowi tych parametrów, otrzymujemy materiał, który będzie posiadał największą trwałość przy najniższym koszcie. Obecnie oprócz wspomnianych wcześniej wymogów stawia się także nacisk, aby proces technologiczny wytwarzania materiału nie niszczył naturalnego środowiska. Dlatego aby uwzględnić te wszystkie problemy i wymagania stawiane materiałom inżynierskim stosuje się komputerowe metody modelowania ich własności. Dobrze zbudowany programistyczny model pozwala na szybki i dokładny dobór materiału z uwzględnieniem wszystkich wymagań jemu stawianych.

Rozwój w inżynierii materiałowej doprowadził do zwiększenia konkurencji na rynku, także dla stali odpornych na korozję. Powłoki antykorozyjne nanoszone na materiał wykazują bardzo wysoką trwałość jak i posiadają wysokie cechy estetyczne. Jednak zastosowanie tradycyjnych materiałów odpornych na korozję gwarantuje odporność materiału w całym jego przekroju, zapewniając trwałość wykonanej konstrukcji nawet w przypadku delaminacji powłoki czy też powstania w niej wżerów. Własności tych materiałów ściśle zależą od ich składu chemicznego i rodzaju ich obróbki. Dlatego aby uzyskać wymagane własności wytrzymałościowe i względnie niski koszt tych materiałów, należy odpowiednio dobrać pierwiastki wchodzące w jego skład jak i odpowiednią obróbkę wykończeniową. Klasyczne podejście tj. wykonanie serii eksperymentów z wytworzeniem niezliczonej ilości próbek w celu określenia własności każdego z gatunku tych stali jest przedsięwzięciem karkołomnym, wymagającym niezwykle wielkiego nakładu czasowego jak i finansowego. Zastosowanie metod sztucznej inteligencji pozwala na wieloaspektowe projektowanie inżynierskie stali odpornych na korozję, nawet przy posiadaniu jedynie niewielkiej liczby wektorów wejściowych [1÷7].

2. CEL I ZAKRES PRACY

Metody sztucznej inteligencji wraz z danymi pozyskanymi na drodze eksperymentów, dają możliwość opracowania modelu, który pozwalał będzie na przewidywanie własności mechanicznych stali ferrytycznych odpornych na korozję na podstawie zmiennych wejściowych. Głównym celem wykonania takiego modelu jest redukcja kosztów związanych z badaniami materiałoznawczymi tych stali, procesów badań metalurgicznych jak i szybszy dostęp do wyników obliczeń. Badania obejmowały opracowanie modeli obliczeniowych zbudowanych z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych dla parametrów wyjściowych: umowna granica plastyczności $R_{0,2}$, wytrzymałość na rozciąganie R_m , wydłużenie A_5 , przewężenie Z i twardość HB stali ferrytycznych odpornych na korozję na podstawie parametrów wejściowych: skład chemiczny stali, parametry obróbki tj. wielkość badanej próbki, czas i temperatura wyżarzania. Aby polepszyć jakość modeli sztucznych sieci neuronowych i usprawnić ich działanie optymalizowano liczbę zmiennych wejściowych algorytmem genetycznym, a następnie zbadano czy odniesiono oczekiwany wynik. Kolejnym zadaniem było zbadanie wpływu zmiennych wejściowych na zmienne wyjściowe, porównanie wyników z innymi sieciami neuronowymi [8÷11].

3. METODOLOGIA BADAŃ

Wszystkie opracowania danych, modelowanie sieci neuronowych a także ich optymalizacje wykonano za pomocą pakietu programów „Statistica”. Pakiet ten zapewnia przejrzysty wgląd w architekturę sieci neuronowych i dostarcza funkcje niezbędne w ich analizie i optymalizacji, a także pozwala na symulowanie wyników działania opracowanych modeli. Pozwala także na zaprojektowanie sieci neuronowych, modyfikacje sposobów uczenia się, oraz szereg narzędzi do badania wyników budowy i optymalizacji powstałych sieci neuronowych takich jak wykresy czy statystyki. Skorzystano także z pakietu Microsoft Office 2010.

4. MODELOWANIE WŁASNOŚCI STALI FERRYTYCZNYCH ODPORNICH NA KOROZJĘ PO OBRÓBCE WALCOWANIA

Do zbudowania sieci neuronowej, która będzie podawała wyniki o wysokim podobieństwie do rzeczywistych wartości wymagana jest odpowiednia ilość zmiennych wpływających na sieć. Zbyt wiele zmiennych może wpłynąć negatywnie na uzyskane rezultaty, powodując szum informacji. Te mniej znaczące dla danej sieci neuronowej należy usunąć. Wybierając zmienne, należy mieć na uwadze to, iż usunięcie zmiennej, która znacząco wpływa na dany obiekt, spowoduje otrzymanie na wyjściu dużo większego błędu. Jednym ze sposobów wybrania odpowiednich zmiennych jest użycie „automatycznego projektanta” sieci neuronowej (ang. *Intelligent Problem Solver*), który na podstawie swoich algorytmów przeszukiwania, wybiera sieci o losowych topografiach, posiadające najmniejszy statystyczny błąd i najlepszą jakość. Innym sposobem jest użycie algorytmu genetycznego. Wskazuje on, które zmienne mają duży wpływ na zmienne wyjściowe, a które nie mają wpływu w ogóle.

4.1. Analiza danych wejściowych

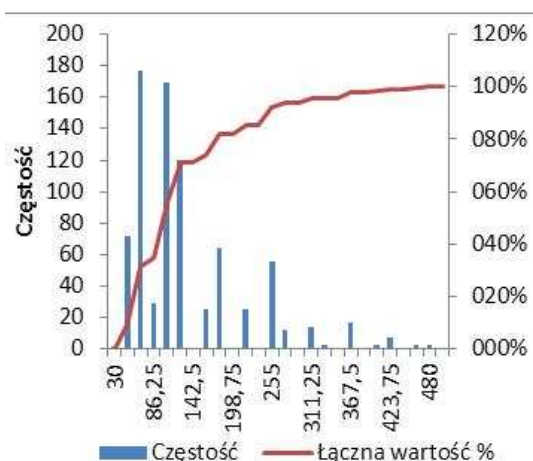
Analiza danych ma na celu sprawdzenie przydatności danych do użycia ich w sztucznych sieciach neuronowych do modelowania i predykcji własności mechanicznych i twardości stali odpornych na korozję. Dane do budowy modeli predykcji własności stali odpornych na korozję pozyskano na drodze badań niektórych gatunków tych stali, z zawartością węgla od 0,3 do 1,2, chromu od 10 do 14% i niklu od 0,1 do 2% i innymi pierwiastkami stopowymi. Stale te zostały poddane obróbce walcowania bruzdowego. Następnie stal poddano wyżarzaniu normalizującemu w określonej temperaturze i określonym czasie. Po obróbce cieplnej wyznaczono umowną granicę plastyczności $R_{0,2}$, granicę wytrzymałości R_m , wydłużenie A_5 , przewężenie Z w próbie statycznego rozciągania i twardość w skali Brinella HB .

Na początku z pozyskanych danych ustala się zakres obowiązywania modelu w sieci neuronowej, który jest różny od wartości minimalnych i maksymalnych zmiennych, dlatego należy zbadać częstość występowania danej zmiennej w tych granicach. Służy do tego narzędzie histogram w programie Microsoft Excel, który pozwala dodatkowo na zobrazowanie uzyskanych wyników w postaci wykresu. Dzięki temu zabiegowi można ustalić faktyczny zakres obowiązywania modelu sztucznej sieci neuronowej.

Najlepsze rozłożenie danych dla danych, które pochodzą od stali odpornych na korozję poddanych walcowaniu bruzdowemu, obserwuje się dla zmiennych: czas (rys. 1), węgiel (rys. 2), mangan, krzem, miedź, i średnicę. Histogramy, które pokazują, że zmienne mogą wpłynąć w jakiś niewielki sposób na sieć to: temperatura obróbki, fosfor, siarka, chrom (rys. 3), nikiel, molibden. Zmienne najbardziej skupione, które prawdopodobnie nie wpłyną wcale na model to: glin, tytan (rys. 4), wanad i wolfram.

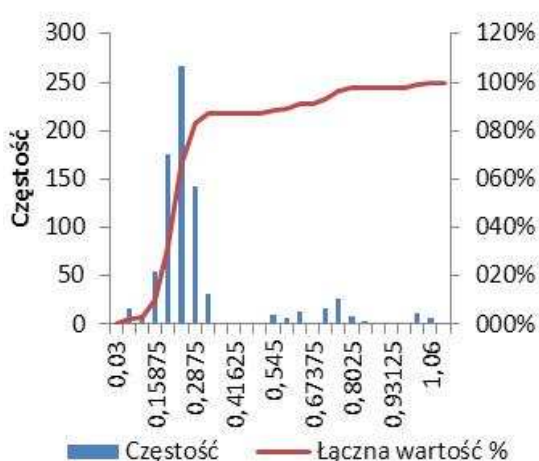
4.2. Budowa sztucznych sieci neuronowych

Do zbudowania modelu sieci neuronowej użyto zbioru zmiennych wejściowych o wartościach przedstawionych w tablicy 1. Kolorem zielonym zaznaczono najbardziej znaczące zmienne z punktu widzenia analizy wykonanej za pomocą narzędzi Microsoft Excel. Kolor żółty oznacza mniej znaczące zmienne, a czerwonym kolorem oznaczono zmienne, które już teraz można odrzucić. Pozostawiono je do późniejszej analizy za pomocą narzędzi sztucznych sieci neuronowej i w celu potwierdzenia założeń.



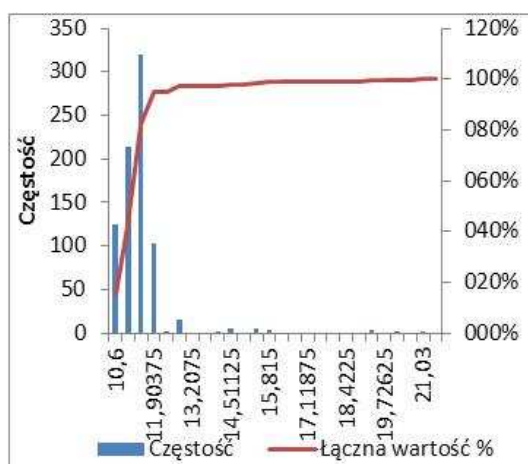
Rysunek 1. Histogram czasu obróbki (stale walcowane)

Figure 1. Histogram of processing time (rolled steels)



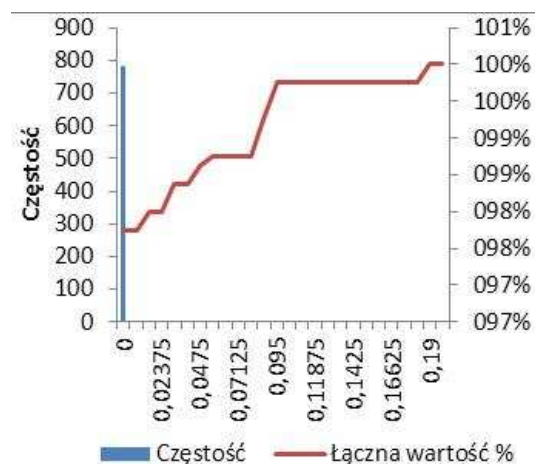
Rysunek 2. Histogram węgla (stale walcowane)

Figure 2. Histogram of carbon (rolled steels)



Rysunek 3. Histogram chromu (stale walcowanie)

Figure 3. Histogram of chrome (rolled steels)



Rysunek 4. Histogram tytanu (stale walcowane)

Figure 4. Histogram of titanium (rolled steels)

Tablica 1. Zakres pierwiastków wejściowych dla badanych stali

Table 1. The range of input elements for the tested steel

	fi	temp	czas	C	Mn	Si	P	S	Cr	Ni	Mo	V	Ti	Cu	Al
min	96	600	49	0,03	0,42	0,18	0,01	0	10,6	0,1	0	0	0	0	0
max	709	980	362	0,94	1,57	0,43	0,02	0,025	20	2,41	2,7	0,01	0,08	0,7	0,03

Sieci neuronowych szukano za pomocą automatycznego projektanta. Następnie poddano je analizie, odrzucono sieci ze zbyt dużym błędem, usuwano sieci ze zbyt wieloma neuronami w warstwie ukrytej, a także sprawdzano ich statystyki regresyjne, zwracano też uwagę na to

czy sieć nie została przeuczona. Wybrano najlepsze sieci bazowe, które użyto później do optymalizacji. Parametry przedstawiono w tabelicy 2. Najważniejsze parametry, którymi kierowano się przy wyborze sieci neuronowej to średni błąd bezwzględny, iloraz odchyleń oraz korelacja Pearsona [12].

Tablica 2. Statystyki najlepszych sieci bazowych

Table 2. Top statistics of underlying network

własność	architektura	Zbiór uczący			Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy		
		ŚBB	IO	KP	ŚBB	IO	KP	ŚBB	IO	KP
$R_{0,2}$	17-3-1-1	21,13	0,58	0,82	18,59	0,52	0,85	20,69	0,51	0,86
R_m	17-5-1	15,03	0,26	0,97	14,84	0,25	0,97	16,75	0,29	0,96
A_5	17-4-1	3,38	0,69	0,72	3,36	0,66	0,75	3,77	0,72	0,70
Z	17-7-1	4,24	0,56	0,83	4,53	0,56	0,83	4,71	0,69	0,74
HB	17-6-1	7,16	0,47	0,88	7,52	0,53	0,85	6,52	0,47	0,88

ŚBB – średni błąd bezwzględny, IO – iloraz odchyleń, KP – korelacja Pearsona

4.3. Optymalizacja sztucznych sieci neuronowych algorytmem genetycznym

Kolejnym etapem była optymalizacja wybranej sieci algorytmem genetycznym. Polegała ona na wygenerowaniu „maski” zmiennych, które użyte będą do zamodelowania sieci neuronowej i zbadanie jej błędu. Poprzez dodanie do każdej zmiennej kary jednostkowej, ogranicza się liczbę zmiennych wejściowych, co może korzystnie wpłynąć na jej statystyki wyjściowe. Parametry algorytmu genetycznego, w każdej próbie były takie same poza karą jednostkową, której wartość rosła w każdym użyciu algorytmu. Populacja algorytmu wynosiła 200 osobników, przy liczbie pokoleń 200. Współczynnik mutacji wynosił 0,1 a krzyżowania 0,4 są to standardowe wartości parametrów dla klasycznego algorytmu genetycznego Hollanda. Aby przyspieszyć działanie programu ustawiono wartość próbkowania na 0,3, skróciło to znacznie czas przeszukiwania algorytmu do około 2 minut i pozwoliło na zwiększenie ilości osobników w populacji i liczby pokoleń, podczas gdy przy wartości 0 tego parametru dla 100 osobników w populacji i liczbie generacji algorytmu 50 czas przejścia jednej iteracji trwał około 10 minut.

Następnie zbudowano sieci neuronowe ze zmiennych, które zasugerował algorytm genetyczny (tab. 3). Do weryfikacji stworzono także sieć neuronową za pomocą automatycznego projektanta, o liczbie zmiennych wejściowych, która zostanie ustalona automatycznie (tab. 4). Następnie porównano statystyki regresyjne stworzonych sieci neuronowych oraz średnie błędy bezwzględnych własności mechanicznych (rys. 5).

Tablica 3. Statystyki najlepszych sztucznych sieci neuronowych poddanych optymalizacji algorytmem genetycznym

Table 3. Stats best artificial neural network genetic algorithm optimization subjects

własność	architektura	Zbiór uczący			Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy		
		ŚBB	IO	KP	ŚBB	IO	KP	ŚBB	IO	KP
$R_{0,2}$	12-4-1	19,62	0,52	0,85	17,41	0,44	0,90	17,65	0,45	0,89
R_m	12-8-7-1	16,68	0,29	0,96	16,11	0,27	0,96	17,88	0,30	0,95
A_5	15-9-5	3,06	0,62	0,78	3,29	0,66	0,75	3,52	0,66	0,75
Z	12-5-1	4,06	0,54	0,84	3,95	0,52	0,85	4,06	0,54	0,84
HB	12-6-1	5,93	0,45	0,89	7,61	0,52	0,85	6,51	0,47	0,88

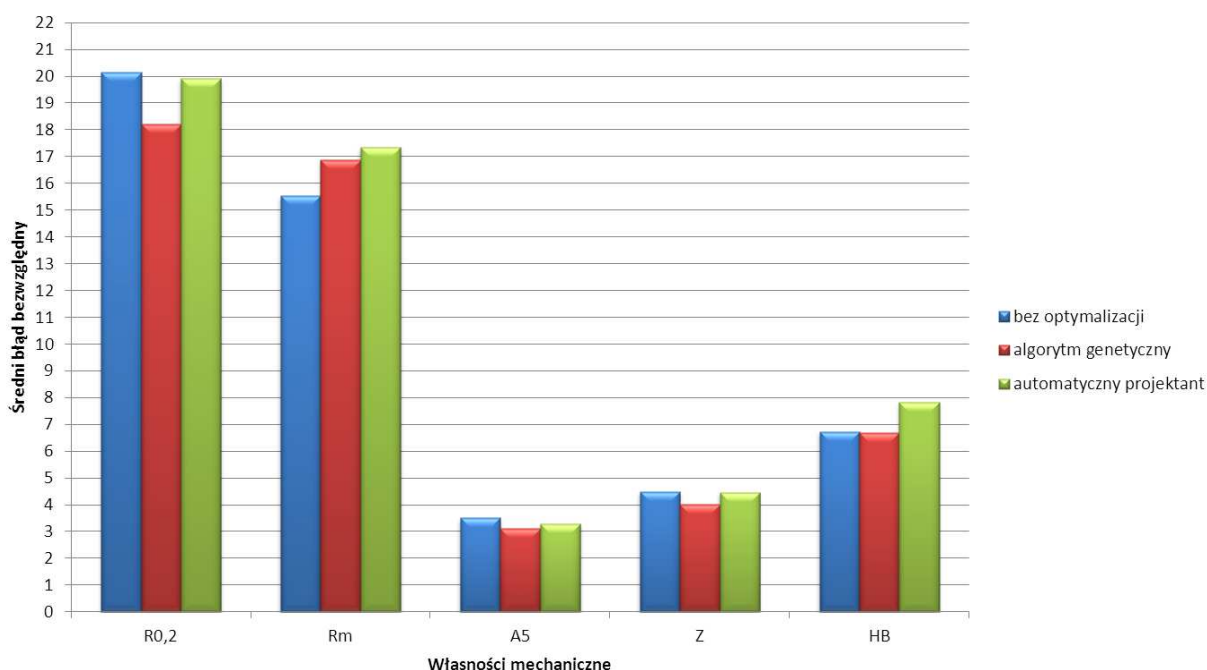
ŚBB – średni błąd bezwzględny, IO – iloraz odchyleń, KP – korelacja Pearsona

Tablica 4. Statystyki najlepszych sztucznych sieci neuronowych zbudowanych przy użyciu automatycznego projektanta

Table 4. Stats best artificial neural networks built using an automated designer

własność	architektura	Zbiór uczący			Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy		
		ŚBB	IO	KP	ŚBB	IO	KP	ŚBB	IO	KP
$R_{0,2}$	13-8-1	20,81	0,55	0,84	19,54	0,51	0,86	19,45	0,51	0,86
R_m	8-4-1	17,35	0,30	0,95	16,55	0,27	0,96	18,18	0,30	0,95
A_5	7-7-1	3,11	0,66	0,75	3,20	0,67	0,74	3,58	0,71	0,71
Z	9-7-1	4,53	0,56	0,83	4,27	0,52	0,85	4,59	0,58	0,82
HB	6-14-1	7,83	0,58	0,82	8,96	0,62	0,78	7,72	0,55	0,84

ŚBB – średni błąd bezwzględny, IO – iloraz odchyłeń, KP – korelacja Pearsona



Rysunek 5. Porównanie średnich błędów bezwzględnych własności mechanicznych

Figure 5. Comparison of mean absolute error of mechanical properties

Analizując statystyki regresyjne sieci neuronowych dla zmiennej wyjściowej $R_{0,2}$ można zauważyć, że najlepsze parametry posiada sieć MLP 12-4-1, średni błąd bezwzględny i ilorazy odchyłeń są najmniejsze, korelacja za to osiąga największe wartości. Najgorzej wypada R_m , gdzie algorytm genetyczny nie poradził sobie, podobnie jak automatyczny projektant. Dla względnego wydłużenia A_5 z analizy statystyk regresyjnych badanych sieci neuronowych wynika, iż posiadającą najlepsze parametry jest ta optymalizowana algorytmem genetycznym o dziewięciu zmiennych wejściowych. W porównaniu do sieci bazowej, nie ma ona tak wysokiego wskaźnika korelacji czy ilorazu odchyłeń jak w zbiorze walidacyjnym, ale dla

wszystkich zbiorów posiada podobne parametry, które i tak są wyższe od wskaźników pozostałych zbiorów sieci bazowej. Zoptymalizowana sieć neuronowa dla względnego przewężenia posiada najlepsze statystyki regresyjne dla wszystkich zbiorów, nieznacznie lepsze od parametrów pozostałych sieci. Jej kolejnym plusem jest posiadanie najmniejszej ilości zmiennych. Statystyki sieci bazowej i zoptymalizowanej obliczające twardość Brinella są do siebie bardzo zbliżone. Pogorszenie statystyk dla sieci zbudowanej z wykorzystaniem automatycznego projektanta jest spowodowany odrzuceniem aż 11 zmiennych wejściowych.

7. PODSUMOWANIE

Celem pracy było opracowanie sztucznych sieci neuronowych służących do predykcji własności mechanicznych stali ferrytycznych odpornych na korozję po obróbce walcowania. Sieci były zoptymalizowane algorytmem genetycznym w celu osiągnięcia lepszych statystyk regresyjnych. Optymalizacja poza przypadkiem modelowania granicy plastyczności R_m pozwoliła na lepsze i dokładniejsze przeszukiwanie sieci neuronowych, które albo wskazywały lepszy albo porównywalny wynik z sieciami bazowymi, a dodatkowo posiadały zmniejszoną liczbę zmiennych wejściowych, które jak wywnioskowano mogły wprowadzać szumy informacji. Za pomocą tych narzędzi uzyskano modele, które z powodzeniem można stosować do przewidywania własności mechanicznych stali ferrytycznych odpornych na korozję.

LITERATURA

1. L.A. Dobrzański, Podstawy nauki o materiałach i metaloznawstwo, WNT, Warszawa, 2002.
2. L.A. Dobrzański, Metalowe materiały inżynierskie, WNT, Warszawa, 2004.
3. Z. Wesołowski, Podstawy walcowania, Katowice, WGH, 1960.
4. L.A. Dobrzański, R. Honysz, Artificial intelligence and virtual environment application for materials design methodology, Journal of Machine Engineering 11/1-2 (2011) 102-119.
5. L.A. Dobrzański, R. Honysz, Computer modelling system of the chemical composition and treatment parameters influence on mechanical properties of structural steels, Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering 35/2 (2009) 138-145.
6. A. Marciniak, J. Korbicz, Przygotowanie danych i planowanie eksperymentu. W: Sieci neuronowe w inżynierii biomedycznej. Tom 9 (red. R. Tadeusiewicz, J. Korbicz, L. Rutkowski, W. Duch), Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa, 2013.
7. Z. Michalewicz, Algorytmy genetyczne + struktury danych = programy ewolucyjne, WNT, Warszawa, 2003.
8. T. Olszewski, P. Boniecki, J. Weres, Algorytmy genetyczne jako narzędzie optymalizacyjne stosowane w sieciach neuronowych, Inżynieria Rolnicza 2 (2005) 137-143.
9. L. Rutkowski, Metody i techniki sztucznej inteligencji, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2006.
10. R. Tadeusiewicz, Sieci Neuronowe, Akademicka Oficyna Wydawnicza, Warszawa, 2001.

11. T. Trzepieciński, Genetic algorithms as an optimization tool of neural networks modelling friction phenomenon, *Mechanika* 83/4 (2011) 63-72.
12. Strona główna statsoft, pomoc Statistica i Statistica Neural Networks, strona internetowa: <http://www.statsoft.pl/> [dostęp 03/06/2014].