

УДК 519.237.8

А.В. Ключев, М.Б. Гитман, В.Ю. Столбов

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия

**ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ
ДИСКРИМИНАНТНОГО АНАЛИЗА МИКРОСТРУКТУР
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПО КОМПЛЕКСУ
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК**

Рассматривается один из подходов к решению задачи дискриминантного анализа микроструктур функциональных материалов по комплексу физико-механических характеристик, основанный на теории нечетких множеств. Предлагаемый подход может быть использован в процессе выборочного контроля качества функциональных и конструкционных материалов. Предполагается, что исходные данные для задачи дискриминантного анализа могут быть получены на основе компьютерного распознавания образов при анализе микроструктуры исследуемого материала по цифровым фотографиям шлифов. Предлагается алгоритм решения задачи дискриминантного анализа зеренно-фазовых структур, позволяющий определять близость исследуемого материала к одному из классов на заданном множестве известных структур по комплексу физико-механических характеристик. Приводится демонстрационный пример применения разработанного алгоритма при анализе микроструктур по фотографиям микрошлифов закаленной стали с заданными прочностными свойствами.

Ключевые слова: функциональные материалы, контроль качества, фотографии микрошлифов, зеренно-фазовая структура, задача дискриминантного анализа, нечеткие множества, распознавание образов.

A.V. Kliuev, M.B. Gitman, V.Iu. Stolbov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

**ONE APPROACH TO SOLVING THE PROBLEM
OF DISCRIMINANT ANALYSIS MICROSTRUCTURES
FUNCTIONAL MATERIALS ON A COMPLEX OF PHYSICAL
AND MECHANICAL PROPERTIES**

This article considered one of the approaches to solving the problem of discriminant analysis of microstructures functional materials on a complex of physical and mechanical characteristics, based on the theory of fuzzy sets. The proposed approach can be use in the process of selective quality control of the functional and structural materials. It is assumed that the initial data for tasks of discriminant

analysis can be obtain from of computer pattern recognition in the analysis of the microstructure of the material on digital images of microsection. An algorithm for solving the problem of discriminant analysis of grain-phase structures, which allows determining the proximity of the material to one of the classes on a given set of known structures on the complex physical and mechanical characteristics. Authors present a demo of the application of the developed algorithm in the analysis of microstructures on photographs microsections hardened steel with desired strength properties.

Keywords: functional materials, quality control, microsections pictures, grain-phase structure, the task of discriminant analysis, fuzzy sets, pattern recognition.

Введение

В последние годы в машиностроении резко возросла роль так называемых функциональных материалов (ФМ), которые обладают заранее заданным физико-механическими свойствами (электрическими, магнитными, прочностными и др.). Иными словами, ФМ должны обладать строго определенными и желательными настраиваемыми физико-механическими свойствами, дающими возможность реализовывать эксплуатационные характеристики конструкций и устройств, не достижимые при использовании других материалов. К таким материалам, в частности, могут быть отнесены различные металлические сплавы и композиты. Создание ФМ с оптимальными свойствами осуществляется путем усиления или подавления («тюнинга») каких-либо свойств уже имеющихся материалов и не возможно без привлечения современных экспериментальных и теоретических подходов. Яркими представителями функциональных материалов являются, например, металлические сплавы с мартенситными превращениями и эффектами памяти формы [1, 2].

Однако при этом возрастает необходимость разработки новых средств автоматизированного контроля качества подобных материалов для анализа сложных зеренных структур на мезо- или микромасштабных уровнях, отвечающих за формирование требуемого комплекса свойств на макроуровне. Это, в свою очередь, приводит к необходимости автоматизации всех этапов контроля качества, особенно при мелкосерийном производстве функциональных материалов.

В настоящее время на большинстве промышленных предприятий и лабораторий материаловедения применяется контроль качества продукции, основанный на анализе микрошлифов этой продукции. Он позволяет получать более полную картину о состоянии материала и его свойствах на макро- и микроуровнях, а также дает возможность контролировать соответствие целого спектра физико-механических свойств без проведения отдельных испытаний по каждому из свойств.

Однако такой подход имеет серьезный недостаток, а именно требует привлечения высококвалифицированных экспертов в области материаловедения и физики твердого тела. В настоящее время становится очевидным, что для повышения эффективности и объективности идентификации свойств материалов необходимо привлекать подходы, основанные на применении современных математических методов обработки данных и алгоритмов искусственного интеллекта при решении задач классификации и идентификации сложных зеренных структур.

До сравнительно недавнего времени в металлургическом производстве при проведении анализа свойств продукции ограничивались лишь проверкой физико-механических свойств на макроуровне [3]. Однако, как известно [4], свойства любого сплава определяются его внутренней структурой. Структура, в свою очередь, зависит от химического состава сплава, технологии его получения и последующей обработки посредством механических, химических, термических и других воздействий. Таким образом, управляя структурой металла, можно получать сплавы с нужными сочетаниями свойств [4].

Сложность и уникальность свойств ФМ приводит к тому, что обеспечить необходимый уровень требований к ним возможно лишь путем ужесточения контроля качества технологических процессов и результатов их применения на всех этапах производства. При этом трудоемкость проведения контроля любой сложной продукции может составлять значительную долю от общего времени ее производства [5], что приводит к необходимости увеличения оперативности контроля качества продукции и внедрения автоматизированных систем оперативного контроля качества [6, 7]. В последние годы разработка автоматизированных систем контроля приобрела особую актуальность, что нашло отражение в ряде научных работ, например в [8]. В случае производства ФМ необходимость повышения степени автоматизации контроля качества усиливается следующими обстоятельствами.

Свойства ФМ и их качество определяются многоуровневой системой факторов, характеризующих технологический процесс на всех стадиях производства. К основным уровням можно отнести:

– состав ФМ, включающий, например, для сталей содержание в них углерода, легирующих элементов, «вредных» металлов, неметаллических включений и пр.;

– структуру ФМ, определяемую, например, для стали наличием аустенитной, ферритной, мартенситной, бейнитной или перлитной фазы или их сочетаний;

– форму ФМ, которая в специальных случаях может иметь вид нанопорошка или нанотрубок, пленок (в том числе пористых), волокна и т.д.

Наиболее простыми методами можно вести контроль показателей качества (и определяющих его факторов) путем измерения физико-механических свойств ФМ (прочности, твердости, вязкости, упругости и др.). Более того, эти методы, хорошо освоенные при производстве конструкционных материалов (КМ), не предъявляют повышенных требований ни к аппаратуре, ни к квалификации работников. Ограничение возможности их использования связано с невозможностью раскрытия с их помощью требуемых уникальных свойств ФМ, поэтому методы позволяют лишь быстро и с минимальными затратами отсеять заведомый брак.

Основные виды контроля качества производимых ФМ связаны с изучением их структуры на основе микроанализа, который включает приготовление микрошлифа, выявление микроструктуры (травление), исследование структуры под микроскопом. Наблюдаемая в микроскопе картина строения материала, называемая микроструктурой [9], характеризуется количеством, формой и расположением фаз, а также размером и анизотропией зерен, которые влияют на механические свойства сплавов.

Очевидно, что значения численных характеристик этих и других факторов, определяющих качество ФМ, должны контролироваться на всех стадиях производства. Вместе с тем сложность процедуры контроля, а также требования к аппаратуре и квалификации персонала неодинаковы для разных факторов.

Необходимый экспертный уровень реально достигается на производстве КМ. Дело в том, что крупнотоннажное малономенклатурное производство подразумевает повторение в течение многих лет одних и тех же производственных циклов. При этом численные характеристики отклонений от заданных производственных параметров подчиняются законам больших чисел и, как следствие, поддаются высококачественной статистической обработке. Результатом такой обработки являются наборы базовых, эталонных образцов микрошлифов, соответствующих качественному протеканию всех стадий производственного процесса,

а также тем или иным отклонениям от заданных параметров процесса. В результате накопления и обобщения огромного набора эмпирических данных были разработаны, официально одобрены и внедрены в производственную практику многочисленные стандарты, составившие методическую базу данного направления контроля качества на предприятии, например ГОСТ 8233–56 «Сталь. Эталоны микроструктуры».

Значительно сложнее обстоят дела с контролем качества технологических процессов производства ФМ. Основная сложность связана с тем, что практика производства таких материалов имеет крайне ограниченный опыт, сами они зачастую представляют собой новые для предприятий-изготовителей классы материалов, и их производство не может базироваться на прецедентном подходе, обычно используемом производителями для решения материаловедческих и технологических задач. С другой стороны, организации-разработчики вряд ли заинтересованы в проведении полного факторного эксперимента по моделированию всех возможных отклонений параметров технологического цикла ФМ от заданных и формированию банков образцов микрошлифов, подобных приведенным в вышеупомянутых стандартах.

Цель данной работы заключается в разработке подхода к решению задачи определения близости исследуемого материала к определенному классу, характеризующемуся заданным комплексом физико-механических характеристик, которые, в свою очередь, однозначно определяются параметрами его зеренно-фазовой структуры. При этом для исследуемого материала физико-механические характеристики считаются неизвестными, а набор параметров структурных характеристик задан. По сути, предлагаемая методика не предполагает задание конкретного вида аппроксимирующей функции и способа приближения к результату в виде, например, метода наименьших квадратов, а позволяет оценивать близость с помощью установления отношений между параметрами зеренно-фазовой структуры для заданных физико-механических характеристик материала.

1. Постановка задачи

Пусть задан набор образцов исследуемого функционального материала. Для каждого образца имеется цифровая фотография микрошлифа, анализируя которую с помощью компьютерного распознавания и сегментации образов [10] можно определить основные параметры зе-

ренно-фазовой структуры. К таким параметрам можно отнести параметры фазового состояния (например, объемные доли фаз), а также параметры зеренной структуры (например, средний размер зерна, коэффициент вариации размера зерна, степень анизотропии зерен, объемную долю зерен и т.п.). Пусть количество выбранных параметров зеренно-фазовой структуры равно некоторому числу k .

Требуется, исходя из анализа параметров зеренно-фазовой структуры исследуемого функционального материала, оценить близость этого материала к определенному классу, характеризующемуся заданным комплексом физико-механических характеристик, в частности прочностных свойств. Считается, что каждый комплекс эксплуатационных характеристик однозначно определяется набором параметров зеренно-фазовой структуры материала. Отметим, что классов материалов, определяемых комплексом физико-механических характеристик, может быть много. Однако с точки зрения разрабатываемого подхода достаточно рассмотреть разделение двух классов и без потери общности распространить полученный алгоритм на любое количество классов. Кроме того, при обосновании гарантированного качества исследуемого функционального материала достаточно рассмотреть два класса, один из которых включает материалы, удовлетворяющие заданным требованиям по физико-механическим характеристикам, а другой – материалы, у которых хотя бы одна характеристика выходит за допустимый диапазон значений.

Поставленная задача относится к задачам дискриминантного анализа, общую постановку которой можно найти, например, в работе [11]. В соответствии с ней необходимо найти такую решающую функцию $f : X \rightarrow R$, для которой выполняются следующие условия:

$$\begin{cases} f(\mathbf{x}) > 0 & \text{для } \forall \mathbf{x} \in a_1, \\ f(\mathbf{x}) < 0 & \text{для } \forall \mathbf{x} \in a_2, \end{cases} \quad (1)$$

где a_1, a_2 являются двумя заранее заданными классами. Как уже отмечалось, хотя постановка записана для случая с двумя классами, ее без потери общности можно распространить на любое количество классов.

Компоненты вектора \mathbf{x} являются информативными признаками, а уравнение $f(\mathbf{x}) = 0$ образует гиперповерхность, разделяющую объекты в пространстве их признаков.

Рассмотрим существующие методы решения такой задачи.

2. Обзор существующих методов

В задачах кластеризации весьма популярными являются подходы к решению, основанные на понятии расстояния между объектами. Чем меньше расстояние, тем больше объекты похожи друг на друга. Понятие расстояния приводит к необходимости введения метрики на множестве X . Обзор мер близости объектов можно найти в работе [12]. В исследовании [11] показано, что данный подход эквивалентен поиску решающей функции из (1) как минимум для евклидова пространства.

В зависимости от вида решающей функции выделяют различные виды задач, разделяющие объекты в пространстве их признаков. Самым эффективным случаем с точки зрения реализации являются линейно разделяемые пространства [13]. В связи с этим, даже если объекты не могут быть линейно разделены, обычно применяют методы линейаризации, т.е. сведения исходной задачи к линейной или кусочно-линейной задаче классификации. В случае линейно разделяемых множеств признаков решающая функция $f(\mathbf{x})$ является линейной вида

$$f(\mathbf{x}) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n. \quad (2)$$

Не все объекты в n -мерном пространстве могут быть разделены на классы. Например, на рис. 1 показано двухмерное пространство признаков, которое является линейно разделимым.

Тем не менее попытка разделить множество объектов исключительно по признаку x_2 окажется неудачной, так как множества признаков объектов в этом случае будут пересекаться. Это важное замечание, так как оно приводит к методу ядер [14]. Такие методы позволяют разделить объекты в пространстве пересекающихся множеств признаков путем увеличения размерности задачи. На рис. 2, а показан частный случай, когда множество признаков в двухмерном пространстве линейно неразделимо. Переход к трехмерной задаче (рис. 2, б) делает возможным линейную разделимость объектов. Теперь точки в исходной плоскости являются лишь проекциями точек, расположенных на поверхности параболоида. Очевидно, что в данном примере можно

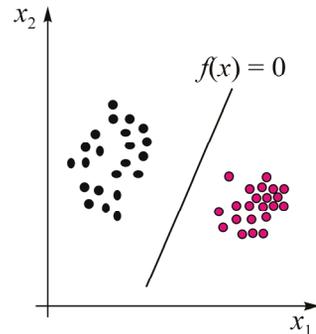


Рис. 1. Линейная разделимость в двухмерном пространстве признаков

провести плоскость, разрезающую параболоид таким образом, что точки, относящиеся к разным классам, окажутся по разные ее стороны. Наиболее известными ядрами являются полиномиальные и сверточные ядра Мерсера [15], гауссовы ядра.

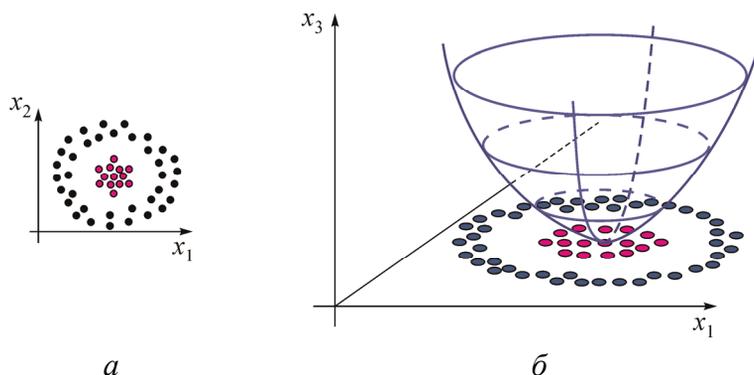


Рис. 2. Линейная разделяемость: *a* – отсутствует в двухмерном пространстве признаков; *б* – присутствует в трехмерном пространстве, образованном параболическим ядром

Недостатком данного подхода является то, что подбор ядра для конкретной задачи является весьма неочевидной и сложной задачей. Кроме того, ведется большая дискуссия по поводу так называемой «естественной» классификации [14]. Суть ее заключается в ответе на вопрос: когда разделение пространства на классы является «соответствующим действительному миру, лишенным внесенного исследователем субъективизма»? Навязывание системе информативных признаков реального объекта дополнительной, априорно заданной степени свободы вряд ли улучшает «естественность» в задачах классификации, будь то кластерный или дискриминантный анализ.

Автор работы [14] развивает идею о том, что «естественность» классификации можно проверить, если решить задачу устойчивости алгоритма классификации к малым возмущениям в пространстве признаков. Данная идея стоит того, чтобы ее проверить для предложенных авторами алгоритмов в будущем.

Даже в рамках решения задачи с линейно разделяемыми признаками возникает неоднозначность при определении коэффициентов в выражении (2). Представим задачу (1) с решающей функцией (2) в виде

$$z_i \mathbf{a} \mathbf{x}_i > 0 \text{ для } \forall i = \overline{1 \dots M}, \quad (3)$$

где z – индикаторная функция, которая равна

$$z = \begin{cases} 1 \text{ для } \forall \mathbf{x} \in a_1, \\ -1 \text{ для } \forall \mathbf{x} \in a_2, \end{cases}$$

где индекс i означает, что пара (\mathbf{x}_i, z_i) берется из обучающей выборки, размера M . Наконец $\mathbf{a} = (a_0, a_1, a_2, \dots, a_n)$ и $\mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_n, 1)^T$. Очевидно, что задача (3) не имеет решений вовсе, либо имеет их бесконечное количество. Чтобы выбрать из них наиболее подходящее решение, требуется применить дополнительный критерий оптимальности. Это делается такими методами, как метод опорных векторов (SVM, Support Vector Machine), предложенный в работе [16], который применяют не только в дискриминантном анализе, но и в задачах кластеризации [17] и регрессионном анализе под названием SVR (Support Vector Regression) [18]. Данный метод хорошо развит, имеет много модификаций и расширений на разные случаи [11].

Следует отметить, что все описанные выше методы хорошо зарекомендовали себя для случая, когда имеется достаточно большая выборка экспериментальных данных или количество признаков невелико и они характеризуются близкой значимостью. Однако для рассматриваемой задачи, как отмечалось выше, объем исходной базы данных обычно невелик, а число классифицирующих признаков может быть значительным, причем часто они имеют нечеткую природу. В связи с этим требуется разработка новых эффективных подходов к решению поставленной задачи, одним из которых может выступать подход, основанный на элементах теории нечетких множеств.

3. Подход к решению задачи дискриминантного анализа при нечетких исходных данных

Рассмотрим процесс получения функционального материала, в качестве которого выступает арматурная сталь с заданными прочностными свойствами, получаемыми путем специальной термообработки конструкционной стали марки 80Р. Изменяя режимы обработки, можно формировать ту или иную зеренно-фазовую структуру материала, которая, в свою очередь, определяет необходимый комплекс физико-

механических характеристик. При этом анализ зеренно-фазовой структуры материала осуществляется экспертным путем по набору фотографий микрошлифов. Например, на рис. 3 приведена фотография микрошлифа стали марки 80P, которая была подвержена термообработке по следующему режиму: нагрев до 930 °С, выдержка в течение 3 мин и охлаждение со скоростью 20 °С/с (исследования проведены в лаборатории металлографии НИИ наносталей при Магнитогорском государственном техническом университете). На этом рисунке представлен результат классификации шлифа экспертами из лаборатории металлографии.

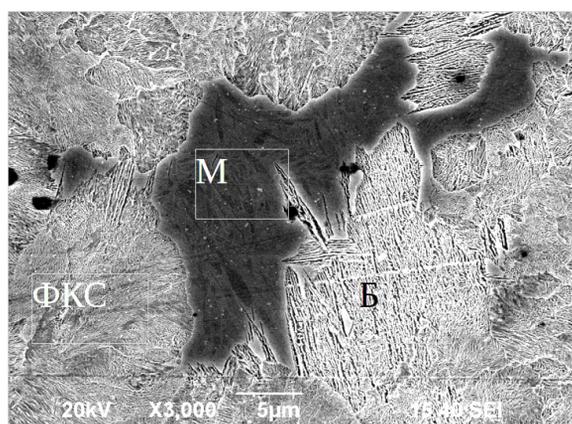


Рис. 3. Результат анализа шлифа экспертами

На рис. 3 видно, что при термообработке, кроме ферритно-карбитной смеси (ФКС), в материале возникают мартенситная (М) и бейнитная (Б) фазы, объемная доля которых существенно влияет на прочностные характеристики материала [19]. Кроме этого, существенное влияние на эксплуатационные свойства исследуемого материала оказывают параметры зеренной структуры: средний размер зерна, коэффициент вариации размера зерна, степень анизотропии зерен и объемная доля зерен (ОДЗ), которые также существенно изменяются в процессе термообработки.

Будем считать, что количество имеющихся экспериментов (микрошлифов и соответствующих каждому из них замеров эксплуатационных характеристик исследуемого материала) равно l .

Введем специальные нечеткие множества для характеристик зеренно-фазовой структуры и физико-механических характеристик мате-

риала (процедура определения специального нечеткого множества приведена в работе [20]).

Пусть A^i – специальное нечеткое множество, содержащее параметры зеренно-фазовой структуры для i -го эксперимента, C^i – специальное нечеткое множество, содержащее эксплуатационные характеристики для i -го эксперимента.

В качестве основных параметров зеренно-фазовой структуры исследуемого материала выбраны объемная доля фаз (ФКС, М и Б), а также параметры зеренной структуры (средний размер зерна, коэффициент вариации размера зерна, степень анизотропии зерен и ОДЗ).

В качестве эксплуатационных характеристик исследуемого материала выбраны, например, такие прочностные характеристики, как твердость по Виккерсу (HV_{30}) и ударная вязкость (КС).

Отметим, что, как указано в работе [20], в отличие от обычных нечетких множеств, специальные нечеткие множества могут состоять из элементов различной физической природы с разными размерностями. При этом важность каждого i -го элемента специального нечеткого множества (в дальнейшем будем обозначать как μ_i для микросвойств и ν_i – для макросвойств исследуемого материала) соответствует функции принадлежности элемента в обычном нечетком множестве.

Отметим, что общее количество пар элементов в нечетком множестве A^i равно значению d , а общее количество пар элементов в нечетком множестве B^i равно значению w , которые определяются следующим образом:

$$d = \sum_{i=1}^k p_i; \quad w = \sum_{i=1}^r t_i. \quad (4)$$

Таким образом, для каждого i -го эксперимента ($i = 1, \dots, l$) общий вид специальных нечетких множеств A^i и B^i можно представить следующим образом:

$$A^i = \left(\begin{array}{ccc} \text{ФКС} & , & \text{М} & , \dots , & \text{ОДЗ} \\ p_1 - \text{пар элементов} & & p_2 - \text{пар элементов} & & p_k - \text{пар элементов} \end{array} \right),$$

$$C^i = \left(\begin{array}{ccc} c_1 & , & c_2 & , \dots , & c_r \\ t_1\text{- пар элементов} & & t_2\text{- пар элементов} & & t_r\text{- пар элементов} \end{array} \right).$$

Задача оценки близости исследуемого материала к определенному классу, характеризующемуся заданным комплексом физико-механических характеристик C^* , теперь определится мерой близости параметров зеренно-фазовой структуры исследуемого материала к параметрам зеренно-фазовой структуры всех тестовых образцов (число которых равно l), для каждого из которых известно, принадлежит ли этот образец к классу с комплексом физико-механических характеристик C^* или нет.

Для определенности будем считать, что образцы с номерами от 1 до s ($s \leq l$) принадлежат этому классу, а образцы с номерами от $s + 1$ до l – нет. Очевидно, что количество образцов, которые не принадлежат к классу с комплексом физико-механических характеристик C^* , равно m , где $m = l - s$. Отметим, что если все образцы принадлежат (или не принадлежат) классу с характеристиками C^* , то задача принадлежности исследуемого образца этому классу сразу решается однозначно.

Построим процедуру оценки близости исследуемого материала к классу с комплексом физико-механических характеристик C^* .

Обозначим (для упрощения записи) специальное нечеткое множество, содержащее параметры зеренно-фазовой структуры для i -го эксперимента (A^i) через A , а соответствующее специальное нечеткое множество, характеризующее исследуемый материал, – B .

Теперь мера близости между специальными нечеткими множествами A и B , которую обозначим δ_i (так как A соответствует i -му эксперименту), может быть определена следующим образом:

$$\delta_i = \sum_{i=1}^d \mu_i \cdot \left| \frac{(a_i - b_i)}{\max(a_i, b_i)} \right|, \tag{5}$$

где d , как указано выше, определяется количеством пар элементов μ_i/a_i и μ_i/b_i в нечетких множествах A и B соответственно.

Согласно введенному предположению образцы с номерами от 1 до s ($s \leq l$) принадлежат к классу материалов с комплексом физико-механических характеристик C^* , а m образцов к этому классу не принадлежат.

Тогда усредненная мера близости исследуемого материала к классу, характеризующемуся заданным комплексом физико-механических характеристик, может быть определена следующим образом:

$$\delta^+ = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \delta_i. \quad (6)$$

При этом усредненная мера близости исследуемого материала к классу, характеризующемуся комплексом физико-механических характеристик, не соответствующих C^* , определяется как

$$\delta^- = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \delta_i. \quad (7)$$

Теперь, если $\delta^+ < \delta^-$, то исследуемый материал принадлежит к классу с комплексом физико-механических характеристик C^* , в противном случае – не принадлежит.

Следует отметить, что описанная выше методика определения меры близости исследуемого материала к заданному классу может применяться, когда отклонения параметров микроструктуры исследуемого материала от имеющихся экспериментальных образцов не превышают величины максимальных отклонений в имеющихся экспериментальных данных.

Можно рассмотреть еще одну процедуру определения принадлежности исследуемого материала к классу с заданным комплексом физико-механических характеристик C^* . По формуле (5) определим меры близости δ_j всех специальных нечетких множеств A^j к специальному нечеткому множеству B , $j = 1, \dots, l$.

Затем определим минимальное из них:

$$\delta^* = \min(\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_l). \quad (8)$$

Считается, что если $\delta^* = \delta_j$, а специальное нечеткое множество A^j принадлежит к классу с заданным комплексом физико-механических характеристик C^* , то исследуемый материал также принадлежит к этому классу, в противном случае – не принадлежит.

Отметим, что комплекс физико-механических характеристик C^* определяется дополнительно. При этом в качестве C^* можно выбрать некоторое детерминированное значение какой-либо прочностной ха-

рактеристики. Можно определить C^* в виде линейной свертки набора физико-механических характеристик с учетом их важности, специального нечеткого множества и т.п. Например, C^* можно задать следующим образом:

$$C^* = \left(c_i \in \left[c_i^*(v_i), c_i^{**}(v_i) \right], \quad i = 1, \dots, r \right),$$

где $c_i^*(v_i)$ и $c_i^{**}(v_i)$ – заданные значения границ допустимого интервала для i -й физико-механической характеристики исследуемого материала с учетом ее значимости в комплексной оценке эксплуатационных свойств.

4. Пример формирования функционального материала

В качестве демонстрационного примера формирования функционального материала рассмотрим получение арматурной стали с заданными прочностными свойствами путем термообработки с различными скоростями охлаждения (исследования проведены в НИИ наносталей при Магнитогорском государственном техническом университете) [19]. Для выявления качественных и количественных характеристик формирующейся структуры использовался исследовательский комплекс GLEEBLE 3500 с оптическим микроскопом Meiji Techno с применением системы компьютерного анализа изображений Thixomet PRO, а также сканирующий электронный микроскоп JSM 6490 LV.

Результаты обработки экспериментальных данных анализа зеренно-фазовой структуры и эксплуатационных характеристик исследуемой стали, в том числе с использованием интеллектуальных технологий [21, 22], для семи образцов, полученных при различных режимах обработки (скоростях охлаждения), приведены в таблице.

Для тестирования предложенной методики нахождения эксплуатационных характеристик функционального материала в качестве исходных данных выберем образцы № 1, 2, 3, 5, 6, 7 (всего шесть образцов), а в качестве исследуемого – образец № 4. Для упрощения расчетов будем считать, что весь комплекс физико-механических характеристик сведен к твердости по Виккерсу (HV_{30}).

Оценим, будет ли твердость исследуемого материала выше 450 ед., т.е. принадлежит ли он классу материалов, к которому принадлежат образцы с номерами 5, 6, 7 (всего три образца).

Результаты анализа зеренно-фазовой структуры эксплуатационных характеристик исследуемой стали

№ п/п	Скорость охлаждения, °C/c	Параметры зеренной структуры (размеры зерна, мкм)	Параметры фазового состава, %	Твердость материала HV ₃₀
1	10	Средний размер зерна – 0,10 Коэффициент вариации размера зерна – 0,11 Степень анизотропии – 0,98 Объемное содержание зерен – 0,87	ФКС – 100	400
2	20	Средний размер зерна – 0,10 Коэффициент вариации размера зерна – 0,07 Степень анизотропии – 1,14 Объемное содержание зерен – 0,26	ФКС – 60 Бейнит – 10 Мартенсит – 30	412
3	25	Средний размер зерна – 0,16 Коэффициент вариации размера зерна – 0,06 Степень анизотропии – 1,09 Объемное содержание зерен – 0,44	ФКС – 80 Бейнит – 20 Мартенсит – 10	436
4	30	Средний размер зерна – 0,26 Коэффициент вариации размера зерна – 0,17 Степень анизотропии – 1,18 Объемное содержание зерен – 0,98	ФКС – 70 Бейнит – 20 Мартенсит – 20	469
5	40	Средний размер зерна – 0,25 Коэффициент вариации размера зерна – 0,03 Степень анизотропии – 1,25 Объемное содержание зерен – 0,37	ФКС – 50 Бейнит – 30 Мартенсит – 20	554
6	50	Средний размер зерна – 0,21 Коэффициент вариации размера зерна – 0,06 Степень анизотропии – 1,1 Объемное содержание зерен – 0,79	ФКС – 40 Бейнит – 30 Мартенсит – 30	617
7	60	Средний размер зерна – 0,13 Коэффициент вариации размера зерна – 0,07 Степень анизотропии – 1,08 Объемное содержание зерен – 0,91	ФКС – 10 Мартенсит – 90	800

Важности (степени влияния на твердость по Виккерсу) соответствующих параметров зеренно-фазовой структуры будем считать следующими: объемная доля ферритно-карбитной смеси (ФКС) – 0,3, бейнита (Б) – 0,4, мартенсита (М) – 0,5, средний размер зерна – 0,7, коэффициент вариации размера зерна – 0,6, степень анизотропии зерен – 0,6, объемная доля зерен (ОДЗ) – 0,8.

Специальные нечеткие множества строятся на основании таблицы и важностей соответствующих параметров зеренно-фазовой структуры.

Запишем вид A^i , $i = 1, \dots, 7$.

$$\begin{aligned} A^1 &= (0,30/100, 0,4/0, 0,5/0, 0,7/0,10, 0,6/0,11, 0,6/0,98, 0,8/0,87), \\ A^2 &= (0,30/60, 0,4/10, 0,5/30, 0,7/0,10, 0,6/0,07, 0,6/1,14, 0,8/0,26), \\ A^3 &= (0,30/80, 0,4/20, 0,5/10, 0,7/0,16, 0,6/0,06, 0,6/1,09, 0,8/0,44), \\ A^5 &= (0,30/50, 0,4/30, 0,5/20, 0,7/0,25, 0,6/0,03, 0,6/1,25, 0,8/0,37), \\ A^6 &= (0,30/40, 0,4/30, 0,5/30, 0,7/0,21, 0,6/0,06, 0,6/1,1, 0,8/0,79), \\ A^7 &= (0,30/10, 0,4/0, 0,5/90, 0,7/0,13, 0,6/0,07, 0,6/1,08, 0,8/0,91), \end{aligned}$$

в том числе для исследуемого материала:

$$A^4 = B = (0,30/70, 0,4/20, 0,5/20, 0,7/0,26, 0,6/0,17, 0,6/1,18, 0,8/0,98).$$

Используя формулу (5), определим меры близости между специальными нечеткими множествами A^i , $i = 1, 2, 3, 5, 6, 7$ и A^4 , которые обозначим δ_i , $i = 1, 2, 3, 5, 6, 7$:

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \left| 0,3 \frac{(100-70)}{100} \right| + \left| 0,4 \frac{(0-20)}{20} \right| + \left| 0,5 \frac{(0-20)}{20} \right| + \\ &+ \left| 0,7 \frac{(0,1-0,26)}{0,26} \right| + \left| 0,6 \frac{(0,11-0,17)}{0,17} \right| + \left| 0,6 \frac{(0,98-1,18)}{1,18} \right| + \\ &+ \left| 0,8 \frac{(0,87-0,98)}{0,98} \right| = 1,8241. \end{aligned}$$

Аналогичным образом определяются остальные расстояния:

$$\delta_2 = 1,8013; \delta_3 = 1,4152; \delta_5 = 1,3002; \delta_6 = 1,1635; \delta_7 = 1,6236.$$

По формулам (6) и (7) вычислим усредненные меры близости исследуемого материала к классу с характеристикой твердости по Виккерсу (HV_{30}) выше 450 ед.

$$\delta^+ = 1/3(1,3002 + 1,1635 + 1,6236) = 1,3624;$$

$$\delta^- = 1/3(1,8241 + 1,8013 + 1,4152) = 1,6902.$$

$\delta^+ < \delta^-$, что означает, что твердость по Виккерсу (HV_{30}) у исследуемого материала больше 450 ед. (эксперимент это подтвердил, твердость исследуемого материала 469 ед., см. таблицу).

Проверим полученное решение, используя критерий близости, определенный формулой (8).

Ближайшим образцом к исследуемому материалу является образец под номером 6 ($\delta_6 = 1,1635$), а твердость по Виккерсу (HV_{30}) у этого образца – 617 ед. Это означает, что и по этому критерию исследуемый материал можно отнести к классу материалов с твердостью выше 450 ед.

Аналогичным способом с помощью предложенного подхода не сложно решить рассматриваемую задачу для случая комплексного оценивания эксплуатационных свойств исследуемого материала, когда требуется сразу обеспечить несколько его физико-механических характеристик. В этом случае необходимо только задать требуемый комплекс характеристик C^* одним из предложенных выше способов.

Приведенный пример показывает, что предложенный подход может быть использован для решения поставленной задачи и не требует большого количества экспериментальных данных.

Заключение

Сложность задачи контроля качества функциональных материалов обусловлена ее огромной информационной емкостью за счет высокой степени детализации, определяющейся, во-первых, очень большим числом элементов собственно микроструктуры (зерен, фазовых областей, их границ и пр.), во-вторых, дефектами этой микроструктуры за счет посторонних включений, раковин, трещин и пр. и, в-третьих, наличием неопределенностей, связанных с многокритериальностью оценивания, нечеткостью исходной информации из-за дефектов фотосъемки (расфокусировки отдельных частей изображений, бликов, дрожания стола и пр.) и возможными сомнениями экспертов при анализе микроструктур. Решение данной задачи возможно с помощью применения интеллектуальных технологий, основанных на компьютерных методах распознавания сложных структур по цифровой фотографии микрошлифа, а также современного математического аппарата ком-

плексного оценивания физико-механических характеристик исследуемого материала.

Предложен оригинальный подход к решению задачи дискриминантного анализа микроструктуры исследуемого функционального материала по комплексу заданных его физико-механических характеристик с учетом нечеткости исходной информации. Приведены два способа оценки близости комплексной оценки микроструктуры к классу материалов с заданными эксплуатационными свойствами.

Приведен демонстрационный пример решения задачи дискриминантного анализа для арматурной стали, получаемой из стали марки 80Р путем специальной термообработки. Показано, что предложенный подход позволяет определять принадлежность исследуемого материала к заданному классу без дополнительных измерений его физико-механических характеристик.

Список литературы

1. Курдюмов Г.В., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. – М.: Наука, 1977. – 238 с.
2. Shape memory effects in alloys / ed. by J. Perkins. – NY; London: Plenum Press, 1975. – 480 p.
3. Избранные методы исследования в металловедении / под ред. Г.Й. Хунгера, пер. с нем. – М.: Металлургия, 1985. – 416 с.
4. Металловедение и термообработка стали: справ. изд.: в 3 т. / под ред. М.Л. Бернштейна, А.Г. Рахштада. – М.: Металлургия, 1991.
5. Ермолов И.Н., Останин Ю.Я. Методы и средства неразрушающего контроля качества: учеб. пособие для инж.-техн. спец. вузов. – М.: Высшая школа, 1988. – 368 с.
6. Ицкович Э.Л. Рациональный выбор средств измерения в системах автоматизации производства // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2001. – № 12. – С. 43–50.
7. Столбов В.Ю., Гитман М.Б., Федосеев С.А. Управление процессом формирования качества продукции промышленного предприятия // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета Прикладная математика и вопросы управления. – 2016. – № 3. – С. 79–97.

8. Мартюшев Н.В. Программные средства для автоматического металлографического анализа // *Современные проблемы науки и образования*. – 2012. – № 5. – С. 1–6.

9. Материаловедение и технологические процессы машиностроительного производства: лабораторный практикум / С.И. Богодухов, Е.В. Бондаренко, А.Д. Проскурин [и др.]. – Оренбург: Изд-во Оренбург. гос. ун-та, 2004. – 409 с.

10. Stolbov V.Y., Gitman M.B., Sharybin S.I. Application of intelligent technology in functional materials quality control // *Materials Science Forum. Materials Engineering and Technologies for Production and Processing II*. – Vol. 870. – P. 717–724.

11. Потапов А.С. Распознавание образов и машинное восприятие: общий подход на основе принципа минимальной длины описания. – СПб.: Политехника, 2007. – 548 с.

12. Раушенбах Г.В. Меры близости и сходства // *Анализ нечисловой информации в социологических исследованиях*. – М.: Наука, 1985. – С. 169–203.

13. Vapnik V.N. An overview of statistical learning theory // *IEEE Transactions on Neural Networks*. – 1999. – № 10 (5). – P. 988–999.

14. Орлов А.И. Устойчивость в социально-экономических моделях. – М.: Наука, 1979. – 296 с.

15. Mercer J. Functions of positive and negative type and their connection with the theory of integral equations // *Philos. Trans. Roy. Soc.* – 1909. – № 209A. – P. 415–446.

16. Вапник В.Н., Червоненкис А.Я. Теория распознавания образов. – М.: Наука, 1974. – 416 с.

17. A support vector clustering method / A. Ben-Hur, D. Horn, H.T. Siegelmann, V. Vapnik // *Journal of Machine Learning Research*. – 2001. – Vol. 2. – P. 125–137.

18. Smola A.J., Scholkopf B. A tutorial on support vector regression // *Technical Report NC2-TR-1998-030, NeuroCOLT2*. – 1998.

19. Исследование процесса механотермической обработки арматуры из высокоуглеродистых сталей / М.П. Барышников, Д.К. Долгий, К.Ю. Куранов, М.В. Зайцева // *Сталь*. – 2012. – № 2. – С. 89–97.

20. Вожаков А.В., Гитман М.Б., Федосеев С.А. Комплексное оценивание при выборе оптимального плана производства на тактическом уровне с учетом нечетких критериев и ограничений // *Управление большими системами*. – 2010. – Вып. 30. – С. 164–179.

21. Sharybin S.I., Klyuev A.V., Stolbov V.Yu. Complex grain structure of metals and alloys // *Steel in translation*. – 2013. – Vol. 43, № 5. – P. 245–248.

22. Разработка интеллектуальной системы распознавания сложных микроструктур на шлифах металлов и сплавов / С.И. Шарыбин, В.Ю. Столбов, М.Б. Гитман, М.П. Барышников // *Нейрокомпьютеры: разработка, применение*. – 2014. – № 12. – С. 50–56.

References

1. Kurdjumov G.V., Utevskii L.M., Entin R.I. *Prevrashcheniia v zheleze i stali* [Transformations in the iron and steel]. Moscow: Nauka, 1977. 238 p.

2. Shape memory effects in alloys. Ed. by J. Perkins. New York; London: Plenum Press, 1975. 480 p.

3. *Izbrannye metody issledovaniia v metallovedenii* [Selected methods of research in metal science]. Ed. by G.J. Hungera. Moscow: Metallurgii, 1985. 416 p.

4. *Metallovedenie i termoobrabotka stali* [Metal science and heat treatment of steel]. Ed. by M.L. Bernshtein, A.G. Rakhshada. Moscow: Metallurgii, 1991.

5. Ermolov I.N., Ostanin Iu.Ia. *Metody i sredstva nerazrushaiushchego kontroliia kachestva* [Methods and means of nondestructive testing]. Moscow: Vysshiaia shkola, 1988. 368 p.

6. Itskovich E.L. Ratsional'nyi vybor sredstv izmereniia v sistemakh avtomatizatsii proizvodstva [Rational choice of measuring devices in industrial automation systems]. *Promyshlennye ASU i kontroliery*, 2001, no. 12, pp. 43-50.

7. Stolbov V.Iu., Gitman M.B., Fedoseev S.A. *Upravlenie protsessom formirovaniia kachestva produktsii promyshlennogo predpriatia* [Managing the process of formation of an industrial enterprise]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Prikladnaia matematika i voprosy upravleniia*, 2016, no. 3, pp. 79-97.

8. Martiushev N.V. *Programmnye sredstva dlia avtomaticheskogo metallograficheskogo analiza* [Software for automatic metallographic analysis]. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniia*, 2012, no. 5, pp. 1-6.

9. Bogodukhov S.I., Bondarenko E.V., Proskurin A.D. [et al.]. *Materiialovedenie i tekhnologicheskie protsessy mashinostroitel'nogo proizvodstva*

[Materials and processes machine-building production: laboratory practical]. Orenburg: Orenburgskii gosudarstvennyi universitet, 2004. 409 p.

10. Stolbov V.Y., Gitman M.B., Sharybin S.I. Application of intelligent technology in functional materials quality control. *Materials Science Forum. Materials Engineering and Technologies for Production and Processing II*, vol. 870, pp. 717-724.

11. Potapov A.S. Raspoznavanie obrazov i mashinnoe vospriiatie: obshchii podhod na osnove printsipa minimal'noi dliny opisaniia [Pattern recognition and machine perception: a common approach based on the principle of minimum description length]. Saint Petersburg: Politehnika, 2007. 548 p.

12. Raushenbakh G.V. Mery blizosti i shodstva [Measures proximity and similarities]. *Analiz nechislovoi informatsii v sotsiologicheskikh issledovaniakh*. Moscow: Nauka, 1985, pp. 169-203.

13. Vapnik V.N. An overview of statistical learning theory. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1999, no. 10 (5), pp. 988-999.

14. Orlov A.I. Ustoichivost' v sotsial'no-ekonomicheskikh modeliakh [Stability in the socio-economic models]. Moscow: Nauka, 1979. 296 p.

15. Mercer J. Functions of positive and negative type and their connection with the theory of integral equations. *Philosophical Transactions of the Royal Society*, 1909, no. 209, pp. 415-446.

16. Vapnik V.N., Chervonenkis A.Ia. Teoriia raspoznavaniia obrazov [The theory of pattern recognition]. Moscow: Nauka, 1974. 416 p.

17. Ben-Hur A., Horn D., Siegelmann H.T., Vapnik V. A support vector clustering method. *Journal of Machine Learning Research*, 2001, vol. 2, pp. 125-137.

18. Smola A.J., Scholkopf B. A tutorial on support vector regression. *Technical Report NC2-TR-1998-030, NeuroCOLT2*, 1998.

19. Baryshnikov M.P., Dolgii D.K., Kuranov K.Iu., Zaitseva M.V. Issledovanie protsessa mekhanotermicheskoi obrabotki armatury iz vysokouglerodistykh staley [Research thermomechanical processing of reinforcement of high-carbon steels]. *Stal'*, 2012, no. 2, pp. 89-97.

20. Vozhakov A.V., Gitman M.B., Fedoseev S.A. Kompleksnoe otsenivanie pri vybere optimal'nogo plana proizvodstva na takticheskom urovne s uchetom nechetkikh kriteriev i ogranichenii [Comprehensive assessment in selecting the optimal production plan at the tactical level with

fuzzy criteria and constraints]. *Upravlenie bol'shimi sistemami*, 2010, iss. 30, pp. 164-179.

21. Sharybin S.I., Klyuev A.V., Stolbov V.Yu. Complex grain structure of metals and alloys. *Steel in translation*, 2013, vol. 43, no. 5, pp. 245-248.

22. Sharybin S.I., Stolbov V.Iu., Gitman M.B., Baryshnikov M.P. Razrabotka intellektual'noi sistemy raspoznavaniia slozhnykh mikrostruktur na shlifakh metallov i splavov [Development of intellectual recognition of complex microstructures system on thin sections of metals and alloys]. *Neirokomp'iutery: razrabotka, primeneniye*, 2014, no. 12, pp. 50-56.

Получено 14.10.2016

Об авторах

Андрей Владимирович Ключев (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Вычислительная математика и механика», Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: kav@gelicon.biz).

Михаил Борисович Гитман (Пермь, Россия) – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Вычислительная математика и механика», Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: gmb@pstu.ru).

Валерий Юрьевич Столбов (Пермь, Россия) – доктор технических наук, профессор, декан факультета прикладной математики и механики, Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: valeriy.stolbov@gmail.com).

About the authors

Andrei V. Kliuev (Perm, Russian Federation) – Ph.D in Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Computational Mathematics and Mechanics, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: kav@gelicon.biz).

Mikhail B. Gitman (Perm, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Department of Computational Mathematics and Mechanics, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: gmb@pstu.ru).

Valerii Iu. Stolbov (Perm, Russian Federation) – Doctor of Technical Sciences, Professor, Dean of Applied Mathematics and Mechanics Faculty, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614099, Russian Federation, e-mail: valeriy.stolbov@gmail.com).