



УДК 519.21

© 2012

В. И. Большаков, Ю. И. Дубров

## **Определение характеристик качества стали на основании анализа информационной энтропии ее структуры**

*(Представлено академиком НАН Украины М. И. Гасиком)*

*Полученные значения чувствительности характеристик качества стали к изменениям определяющих ее параметров способствуют безошибочному их выбору и ранжированию, что применялось при синтезе базы знаний, которая представлялась уравнениями регрессии.*

В материаловедении существует ряд задач, формализация которых с помощью традиционного математического аппарата представляется затруднительной, а иногда и невозможной [1, 2]. К таким задачам относится, например, задача определения характеристик качества материала исходя из его состава и особенностей микроструктуры. В этой связи напрашивается вывод, инициированный известной теоремой С. Уолфрема [3]. Согласно этой теореме, некоторые процессы, при моделировании которых наблюдаются трудности в их идентификации (хаотические турбулентные течения, вихри в атмосфере, экономические системы, биологическая эволюция и т. д.), описываются только неприводимыми алгоритмами, результаты которых невозможно предсказать, не выполнив их полностью. Таким образом, возникает задача выбора такого метода распознавания состояния стали (ее характеристик качества) на предпроектной стадии ее создания, который был бы инвариантным относительно возмущений, изменяющих эти ее состояния.

В связи с этим обратимся к основным законам и принципам науки, объектами изучения которой являются системы любой природы, способные воспринимать, хранить и перерабатывать информацию (к ним относятся и системы распознавания), — кибернетике. Как следует из этой науки, данные системы должны заимствовать законы и принципы, необходимые для адекватного распознавания характеристик объекта исследования (ОИ). Это, прежде всего, закон необходимого разнообразия (ЗНР). Именно с этих позиций мы рассматриваем процесс создания системы, идентификации качества стали на предпроектной стадии ее создания. Согласно принципиальной схеме (рис. 1), данный процесс включает: ОИ (блок 1); экспертов (блок 2); лицо, принимающее решения (ЛПР) (блок 3); классификатор распознаваемого металла с отнесением его к определенному классу (блок 4); выявление

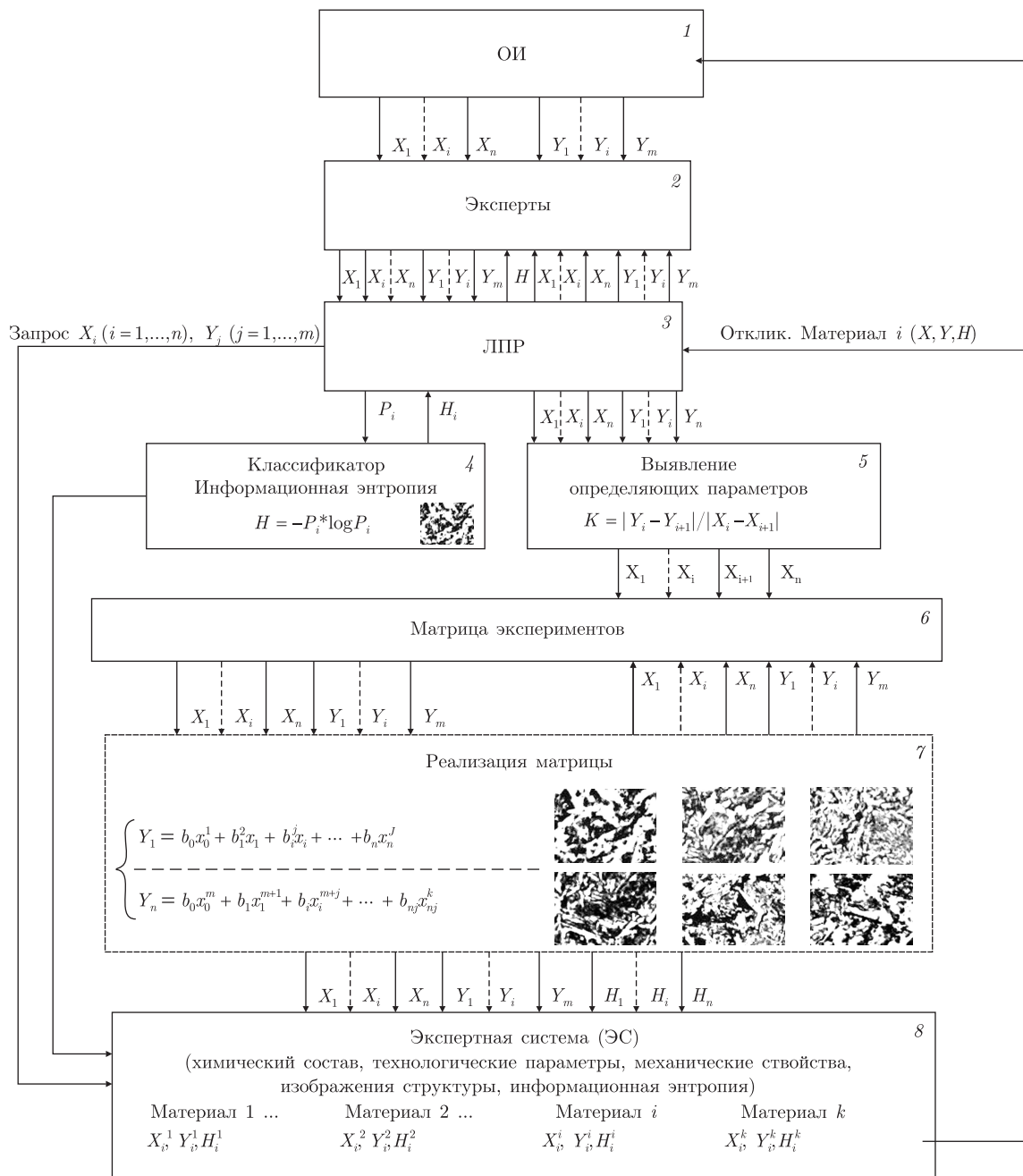


Рис. 1. Схема процесса идентификации стали

определяющих ОИ параметров (блок 5); проведение экспериментов для получения адекватной модели ОИ (блок 6); проверку предсказанных математической моделью значений показателей качества стали (блоки 6, 7); внесение в базу знаний (БЗ) экспертной системы (ЭС) информации об ОИ (блок 8).

**Закон необходимого разнообразия (ЗНР) применительно к распознаванию состояния ОИ.** Как следует из определения первого фундаментального закона кибернетики [4] (У.Р. Эшби), адаптированного к рассматриваемому ОИ, разнообразие его со-

стояний требует их распознавания, обладающего некоторым разнообразием, адекватным разнообразию состояний ОИ.

В настоящее время как в кибернетике, так и в ряде других связанных с ней наук, разнообразие, например, системы распознавания, как правило, достигается применением ЭС, которые включают знания об определенной слабо структурированной и трудно формализуемой узкой предметной области. Поскольку разнообразие ЭС достигается путем применения знаний экспертов с различным уровнем эмпирических и теоретических знаний, то результаты такой экспертизы ощутимо различные (разнообразные), что позволяет использовать их в качестве разнообразия интерпретаций состояний ОИ.

Таким образом, основываясь на ЗНР и отождествляя сложность ОИ с неопределенностью его состояния, принимаем условие (1), согласно которому соблюдается закон необходимого разнообразия, если

$$H(x')_{\text{СР}} \geq H(x)_{\text{ОИ}}, \quad (1)$$

где  $H_{\text{СР}}(x')$  — информационная энтропия системы распознавания с числом состояний  $x'$ ;  $H_{\text{ОИ}}(x)$  — информационная энтропия объекта исследования (структуры металла) с числом состояний  $x$ . Этот факт отображен на схеме рис. 1 взаимно связанными блоками 1–8, где, согласно ЗНР, сигнал, характеризующий состояние ОИ, проходит на блок экспертизы 2 и, поступая к ЛПР, преобразуется в запрос к ЭС.

Следовательно, для соблюдения ЗНР при формировании системы распознавания характеристик качества стали предлагается применять эмпирическую информацию, являющуюся откликами экспертов (специалистов в заданной области) на поставленные по специально сформированному плану вопросы (блок 6), при этом разнообразие откликов экспертов интерпретируется как энтропия системы распознавания, что обеспечивает выполнение условия (1).

**Информационная энтропия структуры стали. Гипотеза.** *Структура стали взаимосвязана с ее информационной энтропией так, что, в численном значении информационной энтропии, отображаются все характеристики качества стали.*

Как правило, растровые изображения шлифов стали отличаются наличием близких по рисунку более светлых и более темных областей различной площади.

Например, на рис. 2 показано растровое изображение шлифа стали — Ст. 16Г2АФ<sup>1</sup>, где единицей обозначен бейнит, а двойкой — остаточный аустенит. Согласно закону об аддитивности энтропий, характеризующих неопределенность частей какого-либо объекта, определим  $H_{\text{ОИ}}(x)$  как сумму энтропий одинаковых по окрасу  $n$  областей в изображении шлифа:

$$H_{\text{ОИ}}(x) = - \sum_j^n H_{\text{ОИ}}(x_j) \quad \text{при} \quad - \sum_j^n H_{\text{ОИ}}(x_j) = \sum_1^n P(x_j) \log P(x_j). \quad (2)$$

При этом геометрическая вероятность<sup>2</sup>  $P(x_j)$  для областей с одинаковым рисунком и плотностью окраса вычисляется как отношение суммы площадей этих областей  $\sum_1^j s_k$

<sup>1</sup>Как правило, растровые изображения шлифов характеризуются наличием более светлых и более темных областей, которые различаются не только площадью, но рисунком и плотностью его окраса.

<sup>2</sup>Чтобы преодолеть недостаток классического определения вероятности, состоящего в том, что оно не применимо к испытаниям с бесконечным числом исходов, вводят геометрические вероятности попадания точки в область (отрезок, часть плоскости и т. д.). Геометрическая вероятность используется в задачах, когда общее и благоприятное число исходов практически бесконечно.

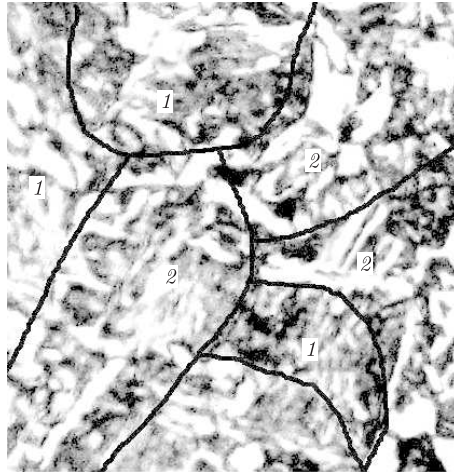


Рис. 2. Структура стали 16Г2АФ ( $\times 500$ )

к полной поверхности всего шлифа  $s$  (рис. 2):

$$P(x_j) = \frac{\sum_{k=1}^j s_k}{s}. \quad (3)$$

В результате вычисления соответствующих площадей геометрические вероятности соответственно равнялись  $P(s_1) = 0,48$ ,  $P(s_2) = 0,32$ . После чего суммарная энтропия  $-\sum_j^n H_{\text{ОИ}}(x_j)$ , согласно уравнению (2), определялась как сумма энтропий одинаковых по плотности окраса и рисунку областей в изображении всего шлифа (бейнит и остаточный аустенит):

$$-\sum_j^n H_{\text{ОИ}}(x_j) \approx -0,48 \lg 0,48 - 0,32 \lg 0,32 \approx 0,342 + 0,364 \approx 0,706. \quad (4)$$

Идеальный случай наблюдается тогда, когда площадь всего шлифа удастся разбить на  $S_n$  ( $i = 1, \dots, n$ ) частей, так что  $\sum_1^j S_n = 1$  (площадь всего шлифа принимается равной единице).

Поскольку почти всегда есть часть площади шлифа, не поддающаяся распознаванию, предлагается вычислять суммарную энтропию с учетом только той части площади шлифа, которая поддается распознаванию [5].

Подобный подход к вычислению информационной энтропии структуры стали, базирующийся на вычислении геометрической вероятности (3), отождествляется с относительно большим числом случайным образом выбранных точек на заданном участке шлифа, отнесенном к общему числу случайным образом выбранных точек на всей его поверхности. В этом, собственно, состоит известный метод Монте-Карло [5, 6], суть которого заключается в задаче вычисления площади сложной фигуры<sup>3</sup>. В итоге мы констатируем тот факт, что

<sup>3</sup>В нашем случае последовательность случайных чисел (которые выбрасывались как точки на поверхность шлифа) генерировалась с использованием специально для этих целей разработанной программы, представляющей своеобразный генератор случайных чисел (ГСЧ) [6].

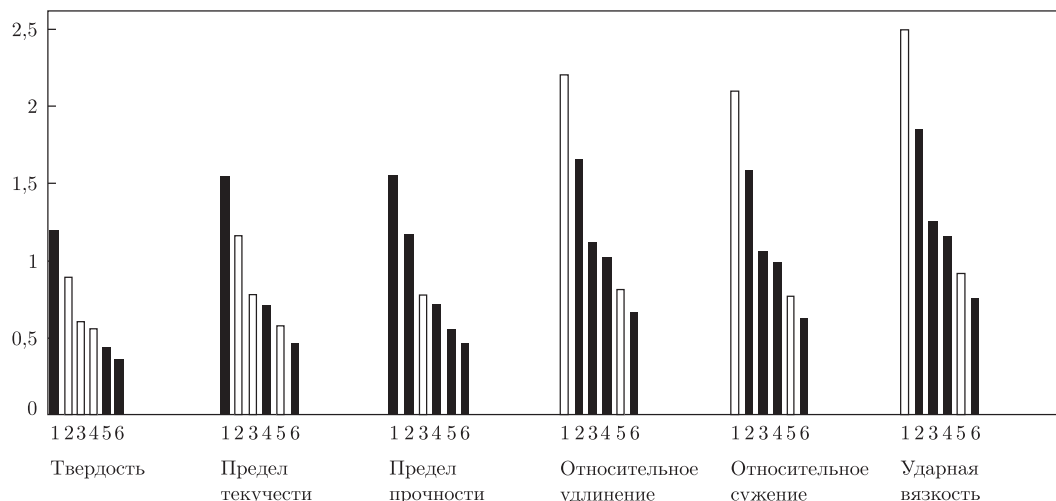


Рис. 3. Влияние определяющих параметров на показатели качества стали

для каждого шлифа стали существует только ей присущая информационная энтропия. Этот факт взят за основу при создании системы распознавания характеристик качества стали.

**Выявление определяющих ОИ параметров.** Для того чтобы модель адекватно представляла ОИ, необходимо, чтобы она включала все параметры, определяющие этот объект. Одним из способов выявления определяющего параметра является установление чувствительности того или иного показателя качества (критерия) к изменениям этого параметра [7]. Для определения чувствительности каждого критерия качества вводится критерий —  $K_i$ , отражающий эту чувствительность к изменениям, например, химического состава материала [6].

Приведем конкретный пример определения чувствительности механических свойств стали к изменениям ее химического состава. Проверялась чувствительность механических характеристик стали 35ХМ к изменениям содержания химических элементов [7, 8].

Рис. 3 демонстрирует “вес” определяющего параметра в установлении численного значения каждого показателя качества стали 35ХМ, где чувствительность каждого механического свойства обозначена так: 1 — содержание углерода С; 2 — содержание хрома Cr; 3 — содержание молибдена Мо; 4 — содержание марганца Mn; 5 — содержание кремния Si; 6 — содержание никеля Ni.

На данной гистограмме можно увидеть, в каком направлении и в какой степени влияет тот или иной элемент химического состава на соответствующее механическое свойство (темным обозначено увеличивающее критерий влияние и наоборот). Отсюда видно, что наибольшее влияние на весь комплекс механических свойств оказывает углерод (увеличивающее влияние — на показатели прочности и уменьшающее влияние — на показатели пластичности). Это объясняется тем, что повышение содержания углерода приводит к повышению твердости стали, так как ее структура после медленного охлаждения состоит из феррита и цементита, а содержание цементита прямо пропорционально содержанию углерода в сплаве.

Поскольку феррит пластичен, а цементит тверд и хрупок, прочность и твердость стали с ростом содержания углерода растут. Известно, что при содержании углерода выше 1% прочность стали вновь начинает снижаться, так как выделяющийся на границах зерен вторич-

ный цементит образует сплошную сетку, которая становится очагом хрупкого разрушения из-за концентрации напряжений на границах зерен. Как видно из гистограммы, наименьшее влияние на свойства стали оказывает никель, что обусловлено тем, что при увеличении процентного содержания никеля увеличиваются прокаливаемость, жаропрочность и жаростойкость, уменьшается хрупкость, измельчается зерно, за счет чего наблюдается небольшое повышение всего комплекса механических свойств. Незначительное влияние обусловлено тем, что легирование в относительно малых количествах не дает большого изменения механических свойств, а легирование в больших количествах нецелесообразно в силу образования значительного количества частиц второй фазы, включающей карбиды и нитриды.

Для увеличения правдоподобия<sup>4</sup> результатов экспертизы группой экспертов устанавливалось влияние легирующих элементов на механические свойства стали коэффициентами, которые изменялись от  $-1$  до  $+1$ , что соответствовало наибольшему отрицательному и наибольшему положительному влиянию определяющего параметра на критерий. Каждый эксперт давал эти оценки с учетом “подсказки”, которая составлялась на основании анализа известных детерминированных данных [3].

**Проведение экспериментов и их анализ.** Для соблюдения ЗНР при формировании системы распознавания характеристик качества стали предлагается применение эмпирической информации, при этом разнообразие откликов экспертов может интерпретироваться как энтропия системы распознавания, что обеспечивает выполнение условия (1).

В качестве плана, по которому формируются вопросы к экспертам, применялась матрица экспериментов (блок 6, рис. 1), строки которой представляют исходные данные для проведения мысленного опыта<sup>5</sup> с предсказанием каждым экспертом результатов этого опыта.

Такой подход к идентификации характеристик качества стали позволяет получать гипотетические уравнения, описывающие, например, зависимости механических свойств стали от ее химического состава и технологических параметров. Экстраполяция или интерполяция этих уравнений позволяет в пределах допустимых значений переменных определять гипотетические значения механических свойств стали, что на предпроектной стадии является одним из основных условий [3, 6, 10–12].

1. *Metropolis N., Ulam S.* The Monte Carlo method // J. Amer. statistical assoc. – 1949. – No 247. – P. 335–341.
2. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Ткаченко А. Н., Ткаченко В. А.* Пути решения задач идентификации качественных характеристик материалов на основе экспертных систем // Доп. НАН України. – 2006. – № 9. – С. 100–103.
3. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Жевтило Е. Ю.* Эмпирическое прогнозирование качественных характеристик материала на предпроектной стадии его создания // Там само. – 2009. – № 6. – С. 103–108.
4. *Введение в кибернетику.* – Москва: Изд-во иностр. лит., 1959. – 432 с.
5. *Дубров Ю. И.* Исследования имитационной модели “бильярдной задачи”, а также ее применение в практике преподавания синергетики // Мат-лы Междунар. науч. конф. “Математика. Компьютер. Образование”. – Дубна, 26–31 янв. 1998 г. – С. 71–83.
6. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Жевтило Е. Ю.* Исследования работоспособности и эффективности эмпирического прогнозирования качественных характеристик стали на предпроектной стадии ее проектирования // Доп. НАН України. – 2009. – № 9. – С. 103–106.

---

<sup>4</sup>Обычно метод наибольшего правдоподобия применяется для нахождения оценок параметров в математической статистике (см. например [9]). В рассматриваемом случае правдоподобие результата экспертизы повышается за счет того, что эксперт дает оценку с учетом закономерностей, полученных в результате существующего анализа причинно-следственных отношений [3].

<sup>5</sup>Например, в каждой строке матрицы указывается процентное содержание компонент металла и технологический режим его производства.

7. *Большаков В. И., Дубров Ю. И.* Об оценке применимости языка фрактальной геометрии для описания качественных трансформаций материалов // Там само. – 2002. – № 4. – С. 116–121.
8. [http://www.splav.kharkov.com/mat\\_start.php?name\\_id=34](http://www.splav.kharkov.com/mat_start.php?name_id=34).
9. <http://www.lnktd-opz.narod.ru/pribor.html>.
10. *Дурнев В. Д., Сапунов С. В., Федюкин В. К.* Экспертиза и управление качеством промышленных материалов. – Ст-Петербург: Питер, 2004. – 254 с.
11. *Смирнов Н. В., Душин-Барковский И. В.* Курс теории вероятностей и математической статистики. – Москва: Наука, 1965. – 512 с.
12. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Жевтило Е. Ю.* Моделирование структуры металла как численно неприводимая задача // Доп. НАН України. – 2011. – № 2. – С. 76–83.

*Придніпровська державна академія  
будівництва та архітектури, Дніпропетровськ*

*Поступило в редакцію 30.05.2011*

**В. І. Большаков, Ю. І. Дубров**

### **Визначення характеристик якості сталі на основі аналізу інформаційної ентропії її структури**

*Отримані значення чутливості характеристик якості сталі до зміни параметрів, що її визначають, сприяють безпомилковому їх вибору та ранжуванню, що застосовувалося при синтезі бази знань, яка подавалася рівняннями регресії.*

**V. I. Bolshakov, Y. I. Dubrov**

### **Estimation of steel quality characteristics on the basis of the analysis of the informational entropy of its structure**

*The obtained values of sensitivity of steel quality characteristics to changes in defining parameters assist a precise choice and a ranking that was applied when creating the knowledge base, which was represented by regression equations.*