

УДК 519.8:669.0

**В. Л. ХРИСТОЛЮБОВ, А. С. ГОРЮХИН, А. Г. СУСЕНКОВ,  
О. С. НУРГАЯНОВА**

### **ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КАЧЕСТВА СПЛАВОВ ПО ХИМИЧЕСКОМУ СОСТАВУ В СИСТЕМЕ ERP**

В статье рассматриваются вопросы прогнозирования качества сплавов (механических свойств) по заранее заданному химическому составу в системе ERP. Дается математическая постановка задачи прогнозирования и предлагается методика ее решения. *Прогнозирование механических свойств ; ERP-система ; математическое моделирование ; зависимость «состав-свойство» ; нейронная сеть.*

Современные системы планирования и управления производством класса ERP при разработке планов предполагают решение задачи прогнозирования, что позволяет более адекватно учитывать изменяющиеся обстоятельства при взаимоотношении поставщика с клиентом [1, 2]. Безусловно, это повышает качество производственного менеджмента.

С 2000 года на ОАО «Уфимском моторостроительном производственном объединении» (УМПО) ведутся работы по внедрению интегрированной системы управления предприятием BAAN V, относящейся к классу ERP-систем. При внедрении в литейное производство системы BAAN ERP УМПО совместно с Уфимским государственным авиационным техническим университетом (УГАТУ) проведена доработка ее функциональности, позволяющая управлять ресурсами на уровне формирования шихтового листа и корректировки химического состава сплава в процессе плавки и разлива, прогнозируя при этом ожидаемые механические свойства отливки.

Для повышения качества производства продукции предлагается использовать функцию прогнозирования при детальном планировании материальных ресурсов. Рассматривается литейное производство, для которого детальное планирование материальных ресурсов определяется химическим составом шихты. Предлагается уже на этапе планирования ресурсов прогнозировать качество получаемых сплавов. Для прогнозирования разрабатывается алгоритм на основе программ-имитаторов нейронных сетей.

Нейросетевой метод является гибким универсальным инструментом, достаточно простым

в понимании и применении. Применение нейронных сетей дает ряд преимуществ перед традиционными подходами к решению подобных задач и позволяет по имеющимся базам данных автоматически получать аналитические модели, наиболее полно отражающие характерные для исследуемой системы причинно-следственные связи между зависимыми параметрами.

#### **1. СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА**

Технический прогресс в любой отрасли промышленности в значительной мере определяется успехами в создании высокоэффективных материалов и технологии их производства.

При разработке новых конструкций механизмов и машин необходимо рассчитывать на те материалы и технологические процессы, которые будут соответствовать уровню техники в момент ввода устройств в эксплуатацию. Разработка новых материалов, по свойствам опережающих требования конструкторов, стимулирует развитие конструкторской мысли и обеспечивает создание новых машин и механизмов, новых технологических процессов [3].

Внедрение информационных систем в литейное производство позволяет при получении отливок формировать базы данных, в которых отражены взаимосвязи химического состава элементов и механических свойств. Большой разброс механических свойств определяется колебанием сплава по химическому составу (хотя в основном сплав не выходит за пределы ГОСТ).

В ряде случаев конструктор изделия повышает требования к механическим свойствам деталей, получаемых из отливок, по верхнему пределу, указанному в ГОСТ. Определить свойства отливки можно только после ее получения,

когда изменить химический состав уже нельзя. Поэтому возможность прогнозирования механических свойств отливки на уровне приготовления сплава позволяет удовлетворить повышенные требования конструктора.

Актуальность создания информационно-аналитических систем (ИАС) в области материаловедения вызвана стремлением облегчить и ускорить определение свойств материалов, перспективных для практических применений. Использование ИАС дает возможность найти взаимосвязи между фундаментальными свойствами неорганических соединений и фундаментальными свойствами химических элементов. Применение найденных взаимосвязей дает возможность проводить прогнозирование образования химических соединений и оценивать их различные свойства без реального синтеза этих соединений, позволяя тем самым существенно экономить материальные и временные ресурсы.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В общем виде математическая постановка задачи представляется следующим образом:

$$Y = F(x_1, x_2, \dots, x_n),$$

где  $Y$  – прогнозируемое свойство,  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  – заданный химический состав [4, 6].

Для решения поставленной задачи существует ряд методов:

1) статистические – регрессионные методы прогнозирования;

2) методы искусственного интеллекта – нейронных сетей с общей регрессией (GRNN).

На основе анализа литературных источников [4, 6, 7] приходим к выводу, что для решения поставленной задачи удобнее всего воспользоваться методом искусственных нейронных сетей (ИНС) по следующим соображениям:

- нейронная сеть позволяет учитывать одновременно большое количество факторных признаков, воздействующих на зависимую величину;

- существуют разработанные программные оболочки, позволяющие моделировать работу нейросети.

### Постановка задачи прогнозирования свойств в терминах теории ИНС

Общей чертой, присущей всем нейронным сетям, является принцип параллельной обработки сигналов, который достигается путем объединения большого числа нейронов в так называемые слои и соединения определенным обра-

зом нейронов различных слоев, а также, в некоторых конфигурациях, и нейронов одного слоя между собой, причем обработка взаимодействия всех нейронов ведется послойно [5].

Применение нейросетей дает ряд преимуществ по сравнению с традиционным подходом к решению подобных задач, позволяя:

1) одновременно учитывать большое количество влияющих параметров, воздействующих на множество зависимых величин;

2) по имеющимся базам данных автоматически синтезировать высокосложные аналитические модели, наиболее полно отражающие характерные для исследуемой системы причинно-следственные связи между влияющими и зависимыми параметрами;

3) автоматически оценить степень влияния каждого из множества воздействующих параметров на зависимые величины;

4) корректировать полученную аналитическую модель с появлением новых данных путем «доучивания» нейросети.

Однако, несмотря на все преимущества, обеспечиваемые нейросетевой моделью при таком подходе, также имеется ряд недостатков:

1) структуру сети и ее обучение необходимо проводить под каждый конкретный класс конструктивных материалов;

2) в связи с большим количеством параметров и полносвязанностью сети, задача имеет высокую вычислительную мощность;

3) сложность/невозможность решения обратной задачи (по заданному свойству определить возможные химические составы).

### Общая постановка задачи обучения по прецедентам

Имеется множество объектов-прецедентов (химические составы сплавов) и множество возможных ответов (прогнозируемое свойство). Между составом и свойством имеется некоторая зависимость, которая неизвестна. Известна только конечная совокупность прецедентов – пар «состав-свойство», называемая обучающей выборкой. На основе этих данных требуется восстановить зависимость, то есть построить алгоритм, способный для любого объекта выдать достаточно точный ответ.

Данная постановка является обобщением классической задачи аппроксимации функций.

Анализ работ [4, 6] показал, что для решения поставленной задачи можно воспользоваться алгоритмом обратного распространения ошибки, используя следующие архитектуры нейронных сетей – многослойный персептрон и сеть с общей регрессией (GRNN).

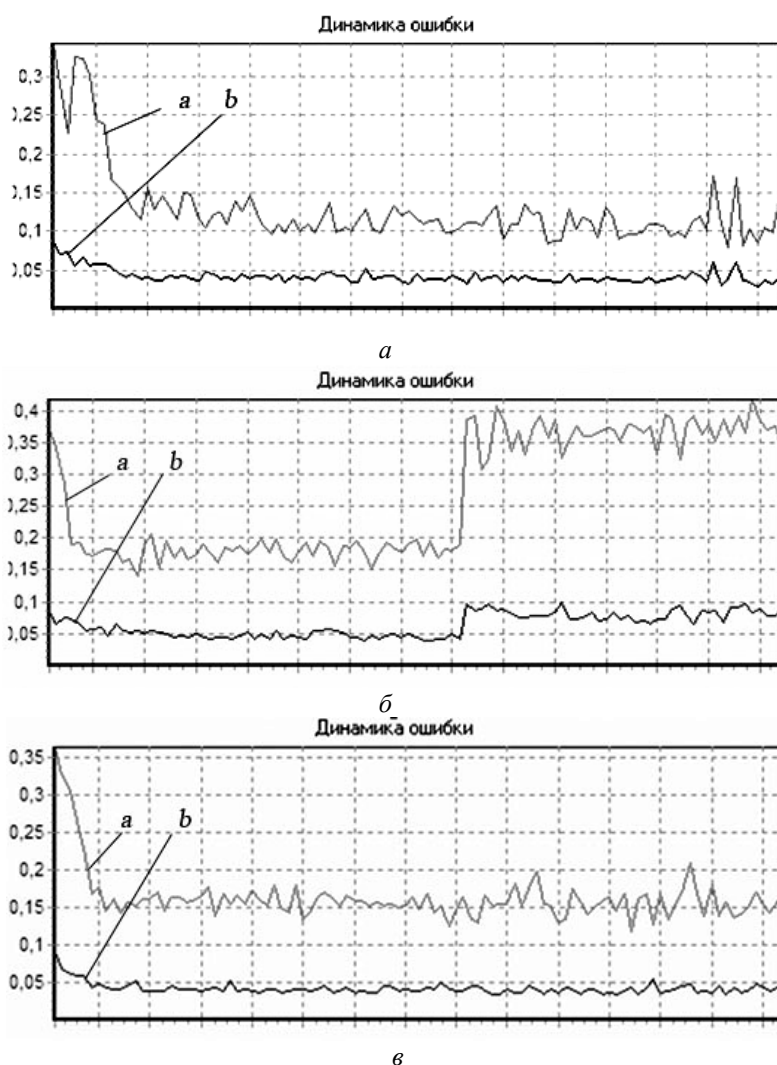
### 3. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Генеральную совокупность составили 50 примеров – сплавы с известным химическим составом и соответствующими свойствами. Случайным образом из генеральной совокупности была сформирована обучающая выборка из 30 примеров. Оставшиеся 20 примеров вошли в проверочную (контрольную, тестовую) выборку. В первом цикле нейросеть обучилась за 10000 эпох (рис. 1, *а*), при этом максимальная ошибка обучения составила 14%, средняя – 4%. Дальнейшее обучение сети привело к эффекту переобучения, о чем свидетельствует увеличение максимальной ошибки до 34% и средней до 9% (рис. 1, *б*).

При изменении параметров сети – добавлении еще одного скрытого слоя с количеством

нейронов равным 2, сеть также обучилась за 10000 эпох (рис. 2, *в*), максимальная ошибка обучения составила 12%, средняя – 3%.

Дальнейшее обучение сети не привело к изменению максимальной и средней ошибок обучения, что свидетельствовало об окончании ее обучения и готовности использования на проверочной выборке. Ниже представлен фрагмент таблицы примеров из обучающей выборки (табл. 1). Последние два столбца содержат фактическое и расчетное значения предела текучести, полученные при помощи нейросети с двумя скрытыми слоями. Из таблицы видно, что на примерах 2, 6 и 11 нейросеть сработала неверно. Примеры из проверочной выборки представлены в табл. 2.



**Рис. 1.** Динамика ошибки обучения нейросети (*а* – максимальная ошибка, *б* – средняя ошибка):  
*а* – персептрон с одним скрытым слоем; *б* – переобучение персептрона с одним скрытым слоем;  
*в* – персептрон с двумя скрытыми слоями

Среднее фактическое значение предела текучести составило 71,1 кг/мм<sup>2</sup>, среднее значение для расчетного предела текучести – 71,55 кг/мм<sup>2</sup>. Стандартное отклонение – 6,61 и 6,67 соответственно. Следовательно, работу нейросети можно считать адекватной решаемой задаче.

Таким образом, в завершение обсуждения задачи аппроксимации целесообразно упомянуть следующие два факта: во-первых, на практике не существует неограниченной выборки данных; во-вторых, не существует нейронных сетей, обладающих бесконечно большой вычислительной мощностью, – она всегда ограничена [5].

Следовательно, существуют два момента, приводящие к ошибке обобщения в нейронных сетях, обучаемых на конечном множестве при-

меров и тестируемых на не встречавшихся ранее данных. Ошибка аппроксимации возникает вследствие ограниченной мощности сети, недостаточной для представления интересующей нас целевой функции.

Ошибка оценивания является результатом недостаточности ограниченного объема информации, содержащегося в примерах обучения. В целом же ошибки аппроксимации в 14% и 12% можно считать приемлемыми для решения поставленной задачи.

Вычислительный эксперимент показал, что для решения поставленной задачи наиболее подходящей архитектурой нейронной сети является многослойный персептрон с двумя скрытыми слоями, обученный методом обратного распространения ошибки с сигмоидной функцией активации.

Таблица 1

№	Al	Ti	Cr	W	Mo	Co	Nb	Fe	Si	C	Предел текучести, кг/мм <sup>2</sup>	Расчетное значение предела текучести, кг/мм <sup>2</sup>
1	2,1	2,1	2,1	2,1	1	10,5	0,69	0,27	0,05	0,06	72,1	73,4
2	2,3	3,2	20	2,6	1,5	10,7	0,83	0,2	0,08	0,06	72,1	<b>71,6</b>
3	2,1	3,3	21,5	2,2	1	10,2	0,66	0,2	0,12	0,09	65	66,38
4	2,3	3,4	20,6	2,3	2	10,9	0,74	0,22	0,14	0,06	69,3	69,4
5	2,4	3	21	2,6	1,5	10,8	0,76	0,31	0,11	1	73,6	74
6	2,6	3,2	21,6	2,6	1,8	11	0,82	0,43	0,1	0,05	72,1	<b>70,96</b>
7	2,2	3,3	22	2,5	1,3	10,9	0,74	0,24	0,07	0,06	68,1	68,58
8	2,3	3,7	21,6	2,1	1	10,1	0,8	0,12	0,08	0,05	67,4	68,65
9	2,5	3,3	21,4	2,6	1,4	11	0,83	0,16	0,05	0,06	67,9	71,37
10	2,3	3,3	21,1	2,5	1,5	10,9	0,9	0,37	0,05	0,06	71,8	72,3
11	2,3	3,5	21,1	2,4	1,3	10,9	0,84	0,2	0,04	0,06	75,3	<b>74,31</b>
12	2,5	3,5	20	2,4	1,3	10,8	0,9	0,19	0,05	0,05	71,8	72,22

Таблица 2

№	Al	Ti	Cr	W	Mo	Co	Nb	Fe	Si	C	Предел текучести, кг/мм <sup>2</sup>	Расчетное значение предела текучести, кг/мм <sup>2</sup>
1	2,4	3,5	21,4	2,6	1,4	10,9	0,87	0,34	0,17	0,06	65,7	68,52
2	2,4	3,3	21,3	2,6	1,2	10,9	0,65	0,06	0,05	0,05	69,4	80,38
3	2,2	3,2	21,4	2,6	1,3	10,7	0,71	0,5	0,08	0,06	66,3	76,38
4	2,4	3,3	20,7	2,6	1,4	11	0,81	0,16	0,05	0,05	80,3	81,82
5	2,4	3,6	22	2,5	1,3	11,1	0,84	0,21	0,07	0,05	74,7	76,49
6	2,6	3,5	20,2	2,5	1,3	11	0,9	0,65	0,12	0,07	56,4	57,55
7	2,5	3,4	21,2	2,4	1,2	11,1	0,9	0,24	0,07	0,05	73,3	76,65
8	2,3	3,2	20,9	2,6	1,3	10,9	0,74	0,27	0,06	0,06	71,4	76,86

## ВЫВОДЫ

1. Таким образом, применение методов искусственных нейронных сетей позволяет прогнозировать механические свойства сплавов по заданному химическому составу.

2. Предложены архитектура сети и алгоритм ее обучения для решения задачи прогнозирования механических свойств сплавов по заданному химическому составу, определены оптимальные параметры сети для обучения.

3. Использование сети на новых данных показало адекватность ее работы.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гаврилов, Д. А.** Управление производством на базе стандарта MRP II / Д. А. Гаврилов. СПб. : Питер, 2003. 352 с.

2. **Питеркин, С. В.** Точно вовремя для России. Практика применения ERP-систем / С. В. Питеркин, Н. А. Оладов, Д. В. Исаев. М. : Альпина Бизнес Букс, 2005. 368 с.

3. **Черный, А. А.** Прогнозирование свойств материалов по математическим моделям : учеб. пособие / А. А. Черный, В. А. Черный. Пенза : Пенз. гос. ун-т, 2007. 61 с.

4. **Нургаянова, О. С.** Применение регрессионного анализа к построению зависимостей «состав-свойство» / О. С. Нургаянова, А. А. Ганеев // Компьютерное моделирование–2005 : мат. 6 междунар. конф., 2005.

5. **Хайкин, С.** Нейронные сети / С. Хайкин. М. : Вильямс, 2006. 1104 с.

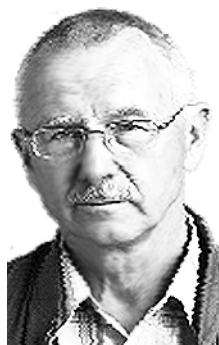
6. **Нургаянова, О. С.** Автоматизированное проектирование литейных жаропрочных никелевых сплавов на основе методов искусственного интеллекта : дисс... канд. техн. наук / О. С. Нургаянова. Уфа, 2006. 147 с.

7. **Басканова, Т. Ф.** Нейросетевые алгоритмы самостоятельной адаптации / Т. Ф. Басканова, Ю. П. Ланкин // Нейроинформатика-99 : сб. науч. тр. Ч.1. М. : МИФИ, 1999. С. 17–24.

## ОБ АВТОРАХ



**Христолюбов Вячеслав Леонидович**, дир. отд. инф. техн. ОАО УМПО. Дипл. инж.-мех. по авиац. двигателям (УАИ, 1991). Канд. техн. наук по тепл. двигателям летательн. аппаратов (УГАТУ, 1998). Иссл. в обл. АСУ производством в авиадвигателестроении.



**Горюхин Александр Сергеевич**, доц. каф. МиТЛП. Дипл. инж.-мех. по металло-реж. станкам и инструментам (УАИ, 1965). Канд. техн. наук по литейн. пр-ву в авиадвигателестроении (МВТУ им. Баумана, 1979). Иссл. в обл. информ. технологии в литейном производстве.



**Сусенков Алексей Геннадьевич**, ст. преп. каф. НГиЧ. Дипл. инж.-мех. по машинам и технологиям литейного производства (УАИ, 1982). Иссл. в обл. информ. технологий в литейном производстве.



**Нургаянова Ольга Сергеевна**, ст. преп. каф. ВМиК. Дипл. инж. по програм. обеспечению ВТ и АС. Канд. техн. наук по системам автоматизации проектирования. Иссл. в обл. искусств. интеллекта, поиска решений в САПР, мат. моделирования и оптимизации.