



УДК 619.21

© 2011

В. И. Большаков, Ю. И. Дубров, Е. Ю. Жевтило

Моделирование структуры металла как численно неприводимая задача

(Представлено академиком НАН Украины М. И. Гасиком)

Досліджується питання оцінки якості матеріалу за допомогою візуального розгляду знімків його структури без проведення випробувань, що дорого коштують. Пропонується проводити оцінку інформаційної ентропії структури як індикатора механічних властивостей матеріалу. Таким чином, ідентифікація характеристик якості матеріалу можлива не тільки на основі традиційних методів, але й шляхом використання теоретико-інформаційного підходу.

В настоящее время в материаловедении существует большое количество работ, направленных на распознавание характеристик качества металла, основанного на анализе его структуры. Обычно такой анализ производится по фотографиям шлифов, отображающих в заданном масштабе структуру исследуемого металла. При этом не учитывается тот факт, что при абсолютно одинаковых условиях получения одного и того же металла (химический состав, технологические режимы его получения и т. д.) абсолютно одинаковых изображений структуры его шлифов, как правило, не наблюдается (см., например, рис. 1, где приведена структура стали 16Г2АФ, взятая с трех шлифов, полученных при одинаковых начальных условиях).

В то же время идентификация механических свойств металла (например, стали) часто проводится путем визуальной оценки снимков его шлифов, зачастую минуя дорогостоящие механические и другие испытания, с присвоением этому металлу характеристик качества на основании интуиции и прошлого опыта, как это, например, показано в табл. 1, взятой из работы [1] и по ней цитируемой.

Подобный подход к оценке качества металла продиктован невозможностью однозначного воспроизведения его структуры и в этой связи отнесением процесса его производства к таким, при моделировании которых наблюдаются трудности в их идентификации. Относительно недавно ученые в области хаотической термодинамики пришли к выводу о том, что подобные процессы (турбулентные течения, вихри в атмосфере, экономические системы, биологическая эволюция) описываются только неприводимыми алгоритмами, что

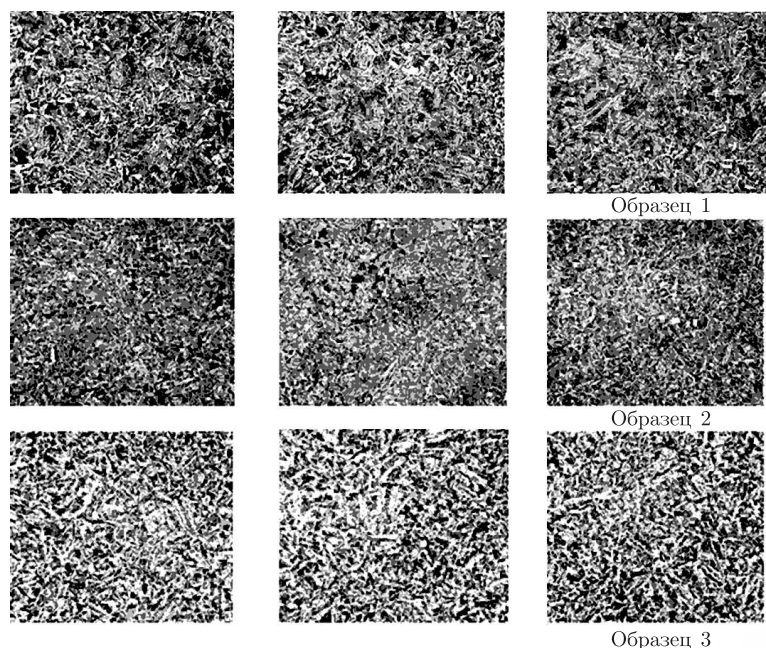


Рис. 1






подтверждает известную гипотезу С. Уолфрема [2]. Причем результаты этих алгоритмов невозможно предсказать, не выполнив их полностью. Данный факт инициирует поиск метода формальной оценки структуры металла, инвариантной относительно неопределенности, которая возникает за счет многообразия изображений его структуры, при практически одинаковых показателях характеристик его качества. Такие задачи встречаются достаточно часто во многих областях науки и их принято называть численно неприводимыми.

Гипотезу о численной неприводимости задачи идентификации характеристик качества металла путем анализа его структуры можно сформулировать следующим образом: разрешающую функцию, областью определения которой является множество растровых изображений шлифов металла, а областью значений — множество векторов, характеризующих его качества, можно создать лишь путем применения алгоритма полного перебора. Вполне очевидно, что, учитывая технические и организационные трудности на этом пути, на данном этапе научно-технического прогресса следует, по крайней мере, временно отказаться от попыток решения этой задачи с помощью “чисто” аналитического аппарата. Это объясняется тем, что получение множества различных растровых изображений шлифов одного и того же металла, при равных начальных условиях его изготовления, можно отнести к случайным событиям, не поддающимся детерминированному анализу.

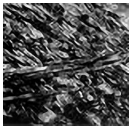

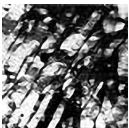

В 1947–1948 гг. американский математик и инженер Клод Шеннон указал принципиально новую область математики, истоки которой связаны с совсем элементарными соображениями о свойствах случайных событий [3]. Основным свойством случайных событий является отсутствие полной уверенности в их наступлении, что создает известную неопределенность при выполнении связанных с этими событиями опытов. Очевидно, что в разных случаях эта неопределенность будет разной.

Степень неопределенности естественно связана с числом возможных исходов k . При $k = 1$ исход опыта вообще не является случайным и, наоборот, при больших значениях k

Таблица 1

Название структуры	Микро-структура	Термическая обработка	Информационная неопределенность	Предел прочности, МПа	Предел текучести, МПа	Относительное удлинение, %	Относительное сужение, %
1	2	3	4	5	6	7	8
Бейнито-мартенситная структура		Закалка с отдельного нагрева в воде без отпуска	0,1612	921	888	13,1	50,3
Бейнитная структура с участками полигонального феррита		Закалка с прокатного нагрева без отпуска (деформация 16,7%)	0,1016	1318	1103	6,9	30,2
Бейнитная структура с участками полигонального феррита		Закалка с прокатного нагрева без отпуска (деформация 34,9%)	0,1538	1300	1140	5,2	43
Бейнито-мартенситная структура		Закалка с отдельного нагрева и отпуска 1ч при 600 °С	0,1428	811	744	13,4	56,7
Речный мартенсит		Закалка с прокатного нагрева и отпуска 600 °С (деформация 16,7%)	0,1332	815	778	16,5	53,6

Таблиця 1. Продовження

1	2	3	4	5	6	7	8
Реечный мартенсит		Закалка с прокатного нагрева и отпуска 600 °С (деформация 34,9%)	0,1216	800	600	7,6	60
Бейнито-мартенситная структура		Закалка в баке с водой без отпуска	0,1048	902	737	5,9	35,7
Реечный мартенсит		Закалка в камерном устройстве без отпуска	0,0412	921	888	6,1	45,3
Реечный мартенсит		Закалка в баке с водой, отпуск 600 °С, 1 ч	0,0706	600	500	16,7	66

предсказание результата опыта весьма затруднительно¹. Невоспроизводимость изображения структуры металла, которая появляется при одинаковых условиях его изготовления, имеет вполне определенную причину. Эта причина является следствием какой-то иной причины и т. д.

Клод Шеннон формально представил неопределенность как информационную энтропию

$$H(x) = - \sum_{i=1}^n P_i \log P_i, \quad (1)$$

где P_i — вероятность наступления события, в нашем случае вероятность появления того или иного растрового изображения шлифа.

Отождествляя энтропию с информацией, Клод Шеннон пришел к выводу о том, что количество информации, приобретаемое при полном выяснении состояния некоторой физической системы, равно энтропии этой системы.

Информационную энтропию — меру неопределенности состояния некоторой физической системы, естественно измерять количеством информации, т. е. уменьшением энтропии этой системы, после получения о ней сведений.

Энтропия $H(x)$ обладает рядом свойств, оправдывающих ее выбор в качестве характеристики степени неопределенности. Во-первых, она обращается в нуль, когда одно из состояний достоверно, а остальные невозможны. Во-вторых, при заданном числе состояний энтропия обращается в максимум, когда эти состояния равновероятны, а при увеличении числа состояний она увеличивается. Также энтропии присуще свойство аддитивности, т. е. когда несколько независимых систем объединяются в одну, их энтропии складываются².

Таким образом, информационная энтропия может выступать в качестве инвариантной оценки структуры металла, если ее определять как сумму энтропий каждой из отличающихся друг от друга по какому-либо признаку областей его шлифа.

На основании изложенного выше мы предлагаем вычислять энтропию $H(x)$ структуры металла, например стали, как сумму энтропий одинаковых по окрасу областей в изображении его шлифа (см. рис. 2).

$$H(x) = - \sum_1^n H(x_n) \quad \text{при} \quad H(x_n) = \sum_1^n P(x_i) \log P(x_i). \quad (2)$$

При этом вероятность $P(x)$ для областей с одинаковым окрасом вычисляется как отношение суммарной поверхности каждой из этих областей $\sum_1^m s_m$, отнесенной к полной поверхности всего шлифа s

$$P(x) = \frac{\sum_1^m s_m}{s}. \quad (3)$$

¹ Например, если бы изображение структуры металла, при параллельных опытах, повторялось и было одинаковым, т. е. $k = 1$, неопределенность была бы равна нулю.

² Методы теории информации позволяют адекватно описывать не только различные физические процессы, но и процессы, происходящие в живых организмах и сообществах (см., например, [5, 6]).

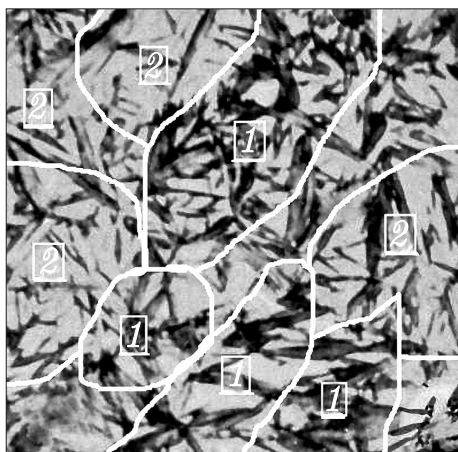


Рис. 2

Как правило, растровые изображения шлифов отличаются наличием близких по окрасу более светлых и более темных областей различной конфигурации. Так, например, на рис. 2 приведено растровое изображение шлифа, содержащего бейнит 1 с остаточным аустени- том 2 для стали Ст 16Г2АФ³, где в результате вычисления соответствующих сумм площа- дей $s_1 = 0,48$ и $s_2 = 0,32$ вероятности, соответственно, равнялись $P(x_1) = 0,48$, $P(x_2) = 0,32$, после чего суммарная энтропия для данной марки стали равнялась $H(x) = 0,0791$. Эта ве- личина является инвариантной характеристикой, или индикатором механических свойств данной марки стали в соответствующей базе данных (см., например, табл. 1).

Такой подход к вычислению геометрической вероятности является справедливым, так как эту вероятность можно отождествить с достаточно большим числом случайным обра- зом выбранных точек на заданном участке поверхности шлифа, отнесенному к относитель- но большому числу случайным образом выбранных точек на всей поверхности шлифа. В этом, собственно, состоит известный метод Монте-Карло [7, 8], суть которого заключается в задаче вычисления площади сложной фигуры.

На квадрат, где расположена фигура, площадь которой следует определить, набрасыва- ют случайные точки A_1, A_2, \dots, A_n . Каждая точка характеризуется координатами X и Y , т. е. $A_1 = (x_1, y_1), A_2 = (x_2, y_2), \dots$

Если случайные числа X и Y будут равномерными в интервале $[0,1)$, то и точки A_1, A_2, \dots, A_n равномерно покроют поверхность квадрата. Пусть N_1 — общее число точек, N_2 — число точек, попавших на фигуру S . Очевидно, что N_1 пропорционально площади квадрата, N_2 — площади фигуры. Площадь фигуры можно оценить по формуле

$$S = S_1 \frac{N_2}{N_1}, \quad (4)$$

где S_1 — площадь квадрата.

Для имитации последовательности случайных точек, выбрасываемых на квадрат, пре- длагается использовать тот или иной генератор случайных чисел (ГСЧ).

До настоящего времени существовало три основных метода получения случайных чисел: физический метод, который используется при составлении таблиц случайных чисел;

³Как правило, растровые изображения шлифов отличаются наличием более светлых и более темных областей, которые различаются не только конфигурацией, но и рисунком, и плотностью его окраса.

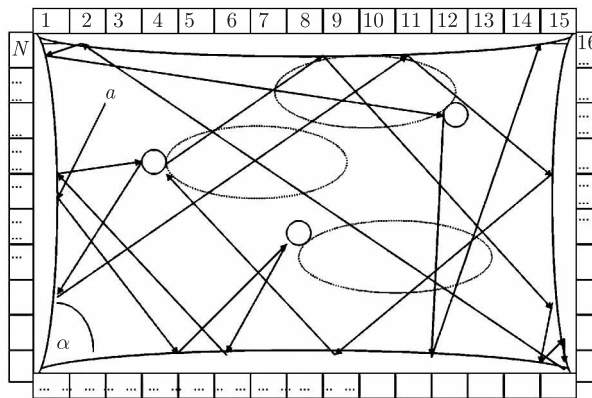


Рис. 3

физико-технический метод, характеризующийся применением дополнительного оборудования;

программный метод, с помощью которого получают последовательности псевдослучайных чисел на основе рекуррентных соотношений.

В нашем случае последовательность случайных чисел генерировалась с использованием специально для этих целей разработанной программы, представляющей своеобразный ГСЧ [9, 10].

Идея этого ГСЧ заключается в том, что среди известных численно неприводимых задач наиболее изученной является так называемая бильярдная задача, основанная на том, что, согласно как теоретическим, так и экспериментальным исследованиям, она подтверждает один из основных результатов численно неприводимых задач: траектория движения отражающегося шара после третьего его соударения непредсказуема. Поэтому траектория движения отражающегося шара (движение которого имитируется лучом), являясь функцией неизвестных факторов, может, в свою очередь, при определенных технических условиях продуцировать последовательность случайных чисел.

Для этого борта бильярда разбиваются на определенное количество ячеек, каждой из которых присваивается определенное число в строго заданной последовательности чисел. Согласно изложенному выше, отражающийся шар, двигаясь по непредсказуемой траектории, “выбивает” из ячеек числа, последовательность которых является псевдослучайной [11]. При этом, для придания большей “хаотичности”, в условия опыта была включена возможность задания деформации бортов бильярда (так называемый китайский бильярд) путем перманентного изменения от шага к шагу их эллипсоидности и постоянного движения шаров — отражателей по заданной траектории (на рис. 2 эти траектории указаны пунктиром). В качестве отражающегося шара испускался луч первоначально с заданным произвольным углом отражения.

Результаты испытаний позволили вычислять вероятности, соответствующие определенным растровым изображениям шлифов, и их информационную энтропию, что показано в табл. 1. В итоге мы констатируем тот факт, что для каждого шлифа определенной марки стали есть своя информационная энтропия, которая может являться индикатором ее механических свойств.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что идентификация характеристик качества стали возможна не только на основе традиционных методов (микроскопия, рентгеноспе-

ктральный и рентгеноструктурный анализы и др.), но и путем применения теоретико-информационного подхода [12], что естественным образом должно способствовать созданию базы данных для каждой марки стали.

1. *Большаков В. И., Дубров Ю. И., Буньковская Т. В.* Пути решения численно неприводимых задач в материаловедении // Моделирование и оптимизация в материаловедении МОК – 42. – Одесса: Астропринт, 2003. – 220 с.
2. *Капица С. П., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г.* Синергетика и прогнозы будущего. – Москва: Эдиториал УРСС, 2001. – 288 с.
3. *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. – № 4. – С. 97–102.
4. *Шеннон К.* Математическая теория связи // Работы по теории информации и кибернетики. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1963. – 117 с.
5. *Волькенштейн М. В.* Молекулы и жизнь. Введение в молекулярную биофизику. – Москва: Прогресс, 1965. – 504 с.
6. *Дубров Ю. И.* Оценка эффективности оросителей на основе информационной энтропии // Теорет. основы хим. технологии. – 1981. – № 3. – С. 55–92.
7. *Бусленко Н. П.* Методы статистических испытаний (метод Монте-Карло). – Москва: Физматгиз, 1962. – 111 с.
8. *Журбенко И. Г.* Определение критической длины последовательности случайных чисел // Вероятностно-статистические методы исследования. – Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1983. – 240 с.
9. *Синай Я. Г.* Динамические системы с упругими отражениями // Усп. мат. наук. – 1970. – 25, вып. 2. – С. 45–53.
10. *Дубров Ю. И.* Исследования имитационной модели “бильярдной задачи”, а также ее применение в практике преподавания синергетики. – Матер. Междунар. науч. конф. “Математика. Компьютер. Образование”, 26–31 янв. 1998 г. – Дубна, 1998. – С. 71–83.
11. *Дубров Ю. И., Фролов В. В., Вахнин А. Н.* Учет влияния неуправляемых факторов при анализе и синтезе критерия функционирования сложных систем // Экономика и мат. методы. – Москва: Изд-во АН СССР. – 1986. – № 1. – С. 165–170.
12. *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.

Приднепровская государственная академия
строительства и архитектуры, Днепрпетровск

Поступило в редакцию 26.03.2010

V. I. Bol'shakov, J. I. Dubrov, O. J. Zhevtilo

The modeling of a metal structure as a numerically undefined problem

This work concerns the question of the material quality estimation with the help of pictures of its structure without holding expensive tests. It is suggested to estimate the informational entropy of a material structure. Thus, the identification of qualities of a material is possible not only with help of traditional methods, but also on the basis of the theoretical-informational approach.