8. Aplikacje komputerowej nauki o materiałach w odniesieniu do stopów Mg-Al-Zn

8.1. Ogólne podstawy aplikacji metod komputerowej nauki o materiałach

Rozwój nowoczesnych narzędzi informatycznych, w tym metod sztucznej inteligencji, powoduje, że są one coraz powszechniej wykorzystywane w różnych dziedzinach nauki i techniki. Również w obszarze inżynierii materiałowej trendy te są w świecie od kilku lat zauważalne dzięki szerokim możliwościom aplikacyjnym, pozwalającym na rozwiązywanie nowych zagadnień, jak i tych uznanych za klasyczne. Na możliwości metod numerycznych istotnie wpływa także postępujący rozwój technologii informatycznych, które pozwalają na znaczący wzrost mocy obliczeniowych oraz obniżenie kosztów systemów cyfrowych [17].

W inżynierii materiałowej stosowane są różnego typu metody obliczeniowe, pozwalające na przybliżanie oraz predykcję zjawisk zachodzących w materiałach podczas wytwarzania, procesów technologicznych przetwórstwa oraz eksploatacji materiałów inżynierskich w różnych warunkach pracy. Do technik wykorzystywanych w ogólnie pojmowanym komputerowym wspomaganiu (CAx) można zaliczyć metody stochastyczne, np. metodę Monte Carlo, metody numeryczne rozwiązywania równań matematycznych, np. metodę elementów skończonych (MES), szeroko rozumiane metody sztucznej inteligencji, np. algorytmy genetyczne, sztuczne sieci neuronowe lub logikę rozmytą. Coraz bardziej popularne są systemy hybrydowe łączące w sobie kilka metod, w celu uzyskania wyników bardziej odzwierciedlających rzeczywiste zjawiska. Metody numeryczne są stosowane także w innych dziedzinach wiedzy i bardzo trudno byłoby obecnie wskazać przynajmniej jeden obszar nauki, w której nie wykorzystano możliwości aplikacyjnych komputerowego wspomagania [17].

Sieci neuronowe są techniką numerycznego modelowania, zdolną do odwzorowywania złożonych funkcji. Obecnie sieci neuronowe mają charakter nieliniowy, co umożliwia użytkownikowi swobodne i łatwe tworzenie modeli nieliniowych, opisujących cechy modelowanych obiektów. Zaletą sieci neuronowych jest fakt, że pozwalają one poszukiwać modeli numerycznych dla słabo znanych zjawisk i procesów, przy czym użytkownik sieci nie musi deklarować żadnej z góry zadanej formy poszukiwanego modelu, a nawet nie musi być pewny, że w ogóle jakaś dająca się opisać matematycznie zależność istnieje [283-294]. Sieci neuronowe są odwzorowaniem podstawowych struktur występujących w mózgu. Z badań anatomicznych przeprowadzonych na mózgu człowieka wynika, iż ten składa się przede wszystkim z bardzo dużej liczby elementarnych komórek nerwowych – neuronów. Sztuczny neuron stanowi podstawową komórkę elementarną sieci neuronowej [17]. Chcąc odwzorować podstawowe założenia działania biologicznych systemów nerwowych twórcy sieci neuronowych zdefiniowali sztuczny neuron następująco:

- do neuronu dociera pewna liczba sygnałów wejściowych; są to wartości danych pierwotnych, przekazywanych do sieci z zewnątrz jako dane do prowadzonych w sieci obliczeń, albo sygnały pośrednie pochodzące od wyjść innych neuronów wchodzących w skład sieci,
- każde wartości wprowadzane są do neuronu poprzez połączenie o pewnej wadze; wagi te muszą odpowiadać wartości synapsy w neuronie biologicznym,
- każdy neuron posiada również pojedynczą wartość progową, określającą jak silne musi być jego pobudzenie, by doszło do jego aktywacji,
- w neuronie obliczana jest ważona suma wejść (to znaczy suma wartości sygnałów wejściowych przemnażanych przez odpowiednie współczynniki wagowe), a następnie odejmowana jest od niej wartość progowa; uzyskana w ten sposób wartość pomocnicza określa pobudzenie neuronu,
- sygnał reprezentujący łączne pobudzenie neuronu przekształcany jest z kolei przez ustaloną funkcję aktywacji neuronu (która określana jest również niekiedy jako funkcja przejścia neuronu); wartość obliczona przez funkcję aktywacji jest ostateczne wartością wyjściową neuronu [295].

Pierwszy matematyczny model sztucznego neuronu opublikowano w pracy [296] już w 1943 roku. W opracowanym modelu neuronu (rys. 8.1.1) wartość sygnału wejściowego *x* jest przemnażana przez współczynniki wagowe *w*, w wyniku czego otrzymywany jest sygnał wyjściowy liniowej części neuronu *s*. Sygnał ten jest obliczany według wzoru [287, 297, 298]:

$$s_i^{(k)}(n) = \sum_{j=0}^{N_{k-1}} w_{ij}^{(k)}(n) x_j^{(k)}(n)$$
(8.1.1)

Następnie sygnał części liniowej poddawany jest przekształceniu nieliniowemu f() (zgodnie z odpowiednią funkcją aktywacji), co daje w efekcie końcowym sygnał wyjściowy nieliniowej części neuronu *y*. Sygnał nieliniowej części neuronu obliczany jest następująco [287, 297, 298]:

$$y_i^{(k)}(n) = f\left(s_i^{(k)}(n)\right) = f\left[\sum_{j=0}^{N_{k-1}} w_{ij}^{(k)}(n) x_j^{(k)}(n)\right]$$
(8.1.2)

gdzie:

s_i^(k)(n) – sygnał wyjściowy liniowej części *i*-tego neuronu, *i*=1,....,N_k warstwy *k*-tej, *k*=1....,L;
y_i^(k)(n) – sygnał wyjściowy *i*-tego neuronu, *i*=1,....,N_k warstwy *k*-tej, *k*=1,....,L;
w_{ij}^(k)(n) – waga *i*-tego neuronu, *i*=1,....,N_k warstwy *k*-tej, *k*=1,....,L, łącząca go z *j*-tym wejściem x_j^(k), *j*=0,....,N_{k-1};
x_i^(k)(n) – *j*-ty sygnał wejściowy, *j*=0,....,N_{k-1}, do warstwy *k*-tej, *k*=1,....,L.



Rysunek 8.1.1. Schemat sztucznego neuronu stosowany do nauki sieci neuronowych [287]

Funkcja $f(s_i^{(k)}(n))$ jest nieliniową funkcją aktywacji neuronu, która na podstawie sygnału wejściowego daje określony sygnał wyjściowy danego neuronu. Dziedziną funkcji jest zbiór wszystkich liczb rzeczywistych. Przykłady funkcji aktywacji zamieszczono w tablicy 8.1.1 [17, 285, 298].

Pojedyncze neurony mogą być grupowane w warstwy w taki sposób, aby mogły mieć wspólne wszystkie sygnały wejściowe. Każda warstwa ma tyle wyjść ile zawiera neuronów. Wszystkie warstwy można połączyć ze sobą wyjściami budując wielowarstwową sieć neuronową. Wśród warstw neuronów budujących sieć neuronową można wyróżnić (rys. 8.1.2): warstwę wejściową, warstwy ukryte, warstwę wyjściową [17, 283, 285, 287, 299].

Funkcja	Definicja	Zakres
Liniowa	y = x	$(-\infty;\infty)$
Logistyczna	$y = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	(0; 1)
Hiperboliczna	$y = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$	(-1; 1)
Wykładnicza	$y = e^{-x}$	$(0;\infty)$
Softmax	$y = \frac{e^x}{\sum_i e^x}$	(0; 1)
Pierwiastek	$y = \sqrt{x}$	$[0;\infty)$
Sinus	$y = \sin(x)$	[0; 1]
Liniowa z nasyceniem	$y = \begin{cases} -1 & \text{dla} x \le -1 \\ x - 1 < x < 1 \\ 0 & \text{dla} x \ge 1 \end{cases}$	[-1; 1]
Progowa	$y = \begin{cases} 0 & \text{dla} x < 0\\ 1 & \text{dla} x \ge 0 \end{cases}$	[0; 1]

Tablica 8.1.1. Przykłady funkcji aktywacji neuronu [299]



Rysunek 8.1.2. Schemat sieci neuronowej wielowarstwowej (opracowany na podstawie [283, 285, 287, 298, 299])

Warstwa wejściowa otrzymuje dane z zewnątrz sieci. Liczba neuronów w tej warstwie jest ściśle zdeterminowana przez liczbę zmiennych wejściowych, które trzeba brać pod uwagę przy rozwiązywaniu określonego zadania. Neurony w tej warstwie nie mają własnych wejść i nie wykonują żadnego przetwarzania danych. Wielkość sygnału wyjściowego w tej warstwie jest określona przez wartość sygnału wejściowego sieci.

Warstwa wyjściowa wytwarza sygnał wyjściowy sieci będący rozwiązaniem stawianych sieci zadań. Liczba neuronów w tej warstwie jest uzależniona od liczby potrzebnych zadań. Sygnał wyjściowy neuronów wyjściowych jest funkcją sygnałów wejściowych pochodzących od warstwy wejściowej (dla sieci dwuwarstwowych) lub (*L*-1) warstwy ukrytej (dla sieci wielowarstwowej) [284, 285, 296]. Wyniki dostarczane przez warstwę wyjściową mają zawsze charakter przybliżony. Dokładność tego sygnału może być różna, jednak o dokładności wielu cyfr znaczących nie można tutaj mówić.

Wyniki mnożenia można przyjąć jako bardzo dobre, jeżeli dokładność odpowiedzi jest lepsza niż dwie cyfry znaczące (błąd w takim przypadku wynosi do kilku procent). Ze względu na te ograniczenia należy definiować tak zadania, aby odpowiedź mogła mieć "charakter zaklasyfikowania" do odpowiedniej kategorii – na przykład można domagać się, by sieć określiła czy temperatura zarodkowania stopu ACAISi7Cu4 po dodaniu 2% Cu "wzrośnie słabo", "wzrośnie znacząco", "będzie stała", "spadnie słabo", "spadnie znacząco" [287, 299].

Warstwy ukryte tworzą dodatkową strukturę przetwarzającą sygnały wejściowe (odebrane przez warstwę wejściową) w taki sposób by warstwa wyjściowa łatwiej mogła znaleźć potrzebną odpowiedź. Efekt działania neuronów w warstwach ukrytych ujawnia się wyłącznie pośrednio, poprzez wartość odpowiedzi jaką wysyła neuronom warstwy wyjściowej [283, 284, 287, 296, 299].

Pierwszą sztuczną sieć neuronową opracował w 1958 roku Rosenblatt – był to perceptron jednowarstwowy. W latach 60. XX wieku perceptrony były utożsamiane ze wszystkimi znanymi wówczas sieciami neuronowymi [299]. Sieć Rosenblatta przygotowano do liniowej klasyfikacji znaków alfanumerycznych.

Charakterystyczną cechą sieci neuronowych, jest możliwość ich uczenia za pomocą tzw. algorytmów uczenia, które umożliwiają adaptację parametrów sieci do specyfiki rozwiązywanego problemu. Stopień złożoności sieci neuronowej oraz efektywność nauczania charakteryzują algorytmy uczenia. Zastosowane algorytmy uczenia wyznaczają podstawowy podział sieci neuronowych ze względu na sposób uczenia. Wyróżnia się dwa typy algorytmów uczenia:

 algorytmy realizujące uczenie nadzorowane – z nauczycielem. Algorytmy te modyfikują wagi i wartości progowe korzystając ze zbiorów uczących zawierających zarówno wartości wejściowe jak i zadane wartości wyjściowe, algorytmy realizujące uczenie nienadzorowane – bez nauczyciela. Algorytmy te modyfikują
wagi i wartości progowe wykorzystując zbiory uczące zawierające jedynie wartości
wejściowe (w przypadku tych algorytmów wartości wyjściowe w zbiorze danych nie są
wymagane, a w przypadku ich wystąpienia są ignorowane) [283, 285, 287, 296, 299].

W tablicy 8.1.2 przedstawiono przykłady algorytmów uczenia sieci neuronowych, natomiast w tablicy 8.1.3 przedstawiono podział sieci neuronowych ze względu na zastosowanie, budowę oraz model sieci.

Sposób uczenia	Algorytm uczenia
	Wstecznej propagacji błędów
	Gradientów sprzężonych
Alexandres assistants as the second sec	Quasi-Newtona
Algorytmy realizujące uczenie nadzorowane	Levenberga-Marquardta
	Szybkiej propagacji
	Delta-Bar-Delta
	Pseudoinwersji
A 1	Kohonena
Algorytmy realizujące uczenie	Próbkowania radialnego
inchauzorowane – bez hauezyeleta	<i>k</i> -średnich

 Tablica 8.1.2. Zestawienie algorytmów uczenia stosowanych do uczenia sieci neuronowych [298]

Tablica 8.1.3. Klasyfikacja sieci neuronowych ze względu na zastosowanie, strukturę oraz model sieci [273, 285, 298, 301]

Kryterium podziału	Typ sieci
	Sieci klasyfikujące
Zastosowania	Sieci aproksymujące
Zastosowanie	Sieci przeprowadzające autoasocjację
	Sieci prognozujące szeregi czasowe
Strukturo	Sieci jednokierunkowe
Shuktura	Sieci ze sprzężeniem zwrotnym (rekurencyjne)
	Perceptron wielowarstwowy (MLP)
	Sieć liniowa
	Sieć o radialnych funkcjach bazowych (RBF)
Model sieci	Probabilistyczna sieć neuronowa (PNN)
	Sieć neuronowa realizująca regresję uogólnioną (GRNN)
	Sieć Kohonena
	Sieć Hopfielda

Uczenie sieci neuronowych algorytmami realizującymi uczenie nadzorowane polega na rozpisaniu i wskazaniu sieci przykładów poprawnego działania, które powinna potem naśladować w czasie bieżącej pracy. Do sieci tego typu zalicza się: perceptron wielowarstwowy (MLP), sieć o radialnych funkcjach bazowych (RBF), probabilistyczną sieć neuronową (PNN) oraz sieci liniowe.

Podczas procesu uczenia następuje adaptacyjny dobór wag połączeń między elementami przetwarzającymi, umożliwiający działanie sieci, polegające na odwzorowaniu danych wejściowych w wyjściowe z możliwie małym błędem.

Odbywająca się w kolejnych cyklach adaptacja wag może być wyrażona zależnością [288, 300]:

$$w_{ij}^{(k)}(n+1) = w_{ij}^{(k)}(n) + \Delta w_{ij}^{(k)}(n)$$
(8.1.3)

gdzie:

 $w_{ij}^{(k)}(n)$ – waga *i*-tego neuronu, $i=1,...,N_k$, warstwy *k*-tej, k=1,...,L, łączącego go z *j*-tym wejściem $x_j^{(k)}$, $j=0,...,N_{k-1}$ dla *n*-tego kroku iteracji,

 $\Delta w_{ij}^{(k)}(n)$ – przyrost (wielkość modyfikacji) wagi *i*-tego neuronu, *i*=1,....,*N_k*, warstwy *k*-tej, *k*=1,....,*L*, łącząca go z *j*-tym wejściem $x_j^{(k)}$, *j*=0,...,*N_{k-l}*,

 $\Delta w_{ij}^{(k)}(n+1)$ – waga *i*-tego neuronu, $i=1,\ldots,N_k$, warstwy *k*-tej, $k=1,\ldots,L$, łącząca go z *j*-tym wejściem $x_j^{(k)}$, $j=0,\ldots,N_{k-1}$ dla n+1 kroku iteracji.

Taki sposób modyfikacji wag może prowadzić do bardzo szybkiego rozwiązania zadania, lub innym razem może wymagać większej liczby iteracji, zwiększając czas nauki, która przebiega samodzielnie.

Przykład neuronu realizującego nadzorowany typ nauczania przedstawiony jest na rysunku 8.1.3. Każdemu wektorowi sygnałów wejściowych *x* towarzyszy prezentacja wzorcowego wektora wyjściowego *d*, wektory te tworzą pary uczące. Wektory $b_i^{(k)}$ i $d_i^{(k)}$ to sygnały wzorcowe części liniowej i nieliniowej neuronu, natomiast $e_i^{(k)}$ i $\varepsilon_i^{(k)}$ to błąd części liniowej i nieliniowej neuronu. Błędy te wynikają z rozbieżności pomiędzy sygnałem wzorcowym a rzeczywistą odpowiedzią sieci. Wielkość błędu dla części liniowej i nieliniowej jest obliczana na podstawie równań [285, 301] :

$$e_i^{(k)}(n) = b_i^{(k)}(n) - s_i^{(k)}(n), \qquad (8.1.4)$$

$$\varepsilon_i^{(k)}(n) = d_i^{(k)}(n) - y_i^{(k)}(n).$$
(8.1.5)

Całkowity błąd jednej epoki treningowej zdefiniowany jest jako suma kwadratów błędów wyjściowych poszczególnych neuronów warstwy ostatniej na podstawie zależności:

$$Q(n) = \sum_{i=1}^{N_L} \varepsilon_i^{(L)^2}(n) = \sum_{i=1}^{N_L} \left(d_i^{(k)}(n) - y_i^{(k)}(n) \right).$$
(8.1.6)

Całkowity błąd popełniany przez sieć jest sumą błędów kolejnych par sygnałów wejściowych i wyjściowych, prezentowanych sieci w trakcie uczenia [285-288].



Rysunek 8.1.3. Model neuronu realizującego nadzorowany tryb uczenia [285]

Uczenie sieci za pomocą algorytmów realizujących uczenie nienadzorowane wymaga zbioru danych zawierających przykładowe (reprezentatywne) wartości zmiennych wejściowych. W tego typu zastosowaniach nie są wymagane wartości docelowe (odpowiedzi). Do sieci tego typu zalicza się: sieci Kohonena, sieci wykorzystujące algorytm próbkowania radialnego oraz algorytm *k*-średnich. Wszystkie te algorytmy stosowane są do określania centrów i odchyleń neuronów radialnych. Sieci te są stosowane głównie do zadań klasyfikacyjnych.

Uczenie sieci realizujących uczenie nienadzorowane jest uczeniem zwanym konkurencyjnym, ponieważ w sieciach tego typu po prezentacji wzorca wejściowego następuje określenie neuronu wygrywającego i tylko ten neuron, ewentualnie grupa sąsiadujących z nim neuronów podlega uczeniu aktualizując swoje wagi, tak aby zbliżyć się do obowiązującego wzorca.

Aktualizacja wag w procesie uczenia za pomocą algorytmu Kohonena opisana jest zależnością [285-288]:

$$w_{ij} = w_{ij(t-1)} + \alpha(t) \cdot h_{ci}(t) \cdot (x_i - w_{ij(t-1)})$$
(8.1.7)

gdzie:

 $\alpha(t)$ – jest malejącym w czasie współczynnikiem uczenia, z przedziału (0,1),

 $h_{ci}(t)$ – określa funkcję sąsiedztwa względem wygrywającego neuronu W_c .

Sieci Kohonena cechują się dwuwymiarową warstwą radialną. Oznacza to, że neurony rozważane są tak, jakby były rozmieszczone w węzłach siatki rozciągającej się w dwóch prostopadłych kierunkach. Każdy neuron ma ustaloną pozycję, wynikającą z numeru "wiersza" i numeru "kolumny", w której jest on lokalizowany. Neurony znajdujące się w sąsiednich wierszach i kolumnach traktowane są jako neurony sąsiednie w stosunku do danego neuronu, co ma dość znaczący wpływ na przebieg uczenia się sieci. Uczenie to przebiega w sposób następujący. Rozpoczynając od początkowych, dobranych losowo centrów (ulokowanych w neuronach radialnych podczas losowego nadawania im początkowych przypadkowych wartości wag), algorytm testuje każdy przypadek uczący i wybiera dla niego najbliższe centrum, rekrutując w ten sposób neuron (w którego wagach zapisane jest to centrum), który dalej rozważany jest jako "neuron zwycięzca". Zwycięzca oraz jego sąsiedztwo są w taki sposób modyfikowane, aby zapisane w nich centra upodobniły się do przypadku uczącego [285, 299-301].

W trakcie procesu uczenia stopniowo zmniejszany jest współczynnik uczenia a(t), który kontroluje stopień upodobniania się centrów do przypadków uczących oraz wielkość sąsiedztwa $h_{cl}(t)$. Oba te parametry procesu uczenia są funkcją czasu. Dlatego też w początkowej fazie algorytm uczenia tworzy w sieci przybliżoną mapę topologiczną, w której podobne skupienia przypadków lokowane są wstępnie w określonym obszarze warstwy radialnej. Zaś w ostatniej fazie procesu uczenia mapa topologiczna jest precyzyjnie dostrajana, tak aby pojedyncze neurony odpowiadały niewielkim skupieniom podobnych do siebie przypadków wejściowych, tworząc w ten sposób pewne klasy podobieństwa wśród wejściowych danych [301].

Sterowaną wersją algorytmu uczącego Kohonena jest algorytm LVQ (ang.: *Learned Victor Quantization*). Standardowy algorytm Kohonena iteracyjnie dopasowuje położenia wektorów wzorcowych, przechowywanych w warstwie radialnej sieci Kohonena, rozpatrując jedynie pozycje istniejących wektorów i dane uczące. Algorytm LVQ próbuje przemieścić wektory wzorcowe na pozycje odpowiadające centrom skupień występujących w danych nie biorąc pod

uwagę etykiety klas przypadków uczących. Najlepszą jakość klasyfikacji osiąga się gdy wektory wzorcowe są rozmieszczone w pewnym stopniu w zakresie klas, tak, by reprezentowały naturalne skupienia wewnątrz każdej klasy. Wektor zlokalizowany na granicy klas, w jednakowej odległości od przypadków z jednej i drugiej klasy, jest nieprzydatny do klasyfikowania. Natomiast wektory znajdujące się dokładnie wewnątrz granic klas działają bardzo dobrze. Modyfikacja wag podczas procesu uczenia algorytmem LVQ opisana jest zależnością 8.1.8 przy zgodności klasy wektora wzorcowego i przypadku uczącego oraz przy niezgodności:

$$w_{ij} = w_{ij(t-1)} - \alpha(t) \cdot h_{ci}(t) \cdot (x_i - w_{ij(t-1)}).$$
(8.1.8)

W celu porównania i weryfikacji poprawności uzyskanych wyników otrzymanych na podstawie badań wykonano analizę komputerową umożliwiającą wyznaczenie i/lub predykcję zjawisk zachodzących w materiałach, w tym w odlewniczych stopach magnezu Mg-Al-Zn, przy wykorzystaniu sieci neuronowych [17]. W zakresie symulacji komputerowych wykonano: modelowanie wybranych parametrów struktury i własności mechanicznych na podstawie temperatury przemian fazowych oraz szybkości chłodzenia, optymalizację warunków obróbki cieplnej, a także wyznaczenie zakresu chropowatości i modelowanie własności mechanicznych powierzchni stopów magnezu obrobionych przy użyciu wtapiania laserowego [17].

8.2. Aplikacje sieci neuronowych do modelowania kinetyki przemian fazowych stopów Mg-Al-Zn podczas chłodzenia

Sieci neuronowe zastosowano do wyznaczania temperatury przemian fazowych na podstawie stężenia masowego aluminium oraz szybkości chłodzenia [17]. Jak wynika z prezentowanych badań stopów Mg-Al-Zn opisanych w rozdziale 3. zmiana ich składu chemicznego oraz szybkości chłodzenia wpływa na zmianę temperatury zarodkowania fazy α , maksymalnej temperatury ustalonego wzrostu fazy α oraz temperatury solidus odlewniczych stopów magnezu. Symulacja procesów odlewania wymaga znajomości poszczególnych wartości temperatury, dlatego opracowano modele sieci neuronowej, posługując się którymi można na podstawie stężenia masowego aluminium oraz szybkości chłodzenia obliczyć wartość poszczególnej temperatury. Do obliczania temperatury zarodkowania fazy α , maksymalnej temperatury zarodkowania fazy α oraz temperatury solidus opracowano sieci jednokierunkowe

typu MLP o 2 neuronach w warstwie wejściowej [17]. Dla zmiennych wejściowych i wyjściowych zastosowano technikę konwersji zmiennych mini-max. Liczba warstw sieci została określona jako trzy warstwy z 8 neuronami w warstwie ukrytej. Funkcje aktywacji w warstwach wejściowych i wyjściowych określono jako liniowe z nasyceniem, w przypadku warstwy ukrytej jako logistyczna, natomiast dla wszystkich warstw zastosowano liniowe funkcje PSP. Sieci uczono metodami wstecznej propagacji błędów (50 epok uczących) oraz gradientów sprzężonych (23 epoki uczące) dla sieci wyznaczającej temperaturę T_{N_2} metodą wstecznej propagacji błędów (50 epok uczących) oraz gradientów sprzężonych (3 epoki uczące) dla sieci wyznaczającej temperaturę T_G oraz metodą wstecznej propagacji błędów (50 epok uczących) oraz gradientów sprzężonych (73 epoki uczące) dla sieci wyznaczającej T_{sol} . W tablicy 8.2.1 przedstawiono wartości błędów, ilorazy odchyleń standardowych oraz współczynniki korelacji zaprojektowanych sieci neuronowych dla zbioru uczącego, walidacyjnego oraz testowego, które to charakterystyki stanowiły podstawe oceny sieci. Na podstawie uzyskanych wskaźników oceny jakości sieci neuronowej, a także ilorazów odchyleń standardowych dla zbioru uczącego i testowego można wnioskować o poprawności w prognozowaniu wartości na wyjściu sieci. Wartości temperatury przemian fazowych zamodelowane na podstawie prezentowanych sieci neuronowych przedstawiono na rysunkach 8.2.1-8.2.3.

	Zbiór uczący		Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy				
Parametr	Architektura sieci	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona
T_N	MLP 2:2-8- 1:1	3,56	0,21	0,97	3,06	0,25	0,97	3,01	0,14	0,99
T_G	MLP 2:2-8- 1:1	2,15	0,16	0,98	1,2	0,07	0,99	1,89	0,12	0,99
T_{sol}	MLP 2:2-8- 1:1	4,54	0,15	0,98	4,6	0,15	0,98	2,83	0,1	0,99

Tablica 8.2.1. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej wykorzystanej do wyznaczenia T_N , T_G oraz T_{sol}



Rysunek 8.2.1. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia magnezu na temperaturę zarodkowania (T_N) fazy α .



Rysunek 8.2.2. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia masowego magnezu na maksymalną temperaturę krystalizacji (T_G) fazy α

Kolejnym analizowanym przykładem jest zastosowanie sieci neuronowych do wyznaczania ciepła generowanego podczas krystalizacji stopów Mg-Al-Zn, na podstawie stężenia masowego



Rysunek 8.2.3. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia Mg na temperaturę solidus (T_{sol})

aluminium oraz szybkości chłodzenia [17]. Dla zmiennych numerycznych wejściowych i wyjściowej zastosowano technikę konwersji zmiennych mini-max. Liczba warstw sieci została określona jako trzy warstwy z 7 neuronami w warstwie ukrytej. Funkcje aktywacji w warstwie wejściowej i wyjściowej określono jako liniowe z nasyceniem, w przypadku warstwy ukrytej jako logistyczną, natomiast dla wszystkich warstw zastosowano liniowe funkcje PSP. Sieci uczono metodą wstecznej propagacji błędów (50 epok uczących) oraz gradientów sprzężonych (112 epok uczących). Iloraz odchyleń standardowych obliczony dla przyjętego modelu sieci neuronowej dla wielkości ziarna wynosi 0,63. W tablicy 8.2.2 przedstawiono wartości błędów, ilorazy odchyleń standardowych oraz współczynniki korelacji zaprojektowanych sieci neuronowych dla zbioru uczącego, walidacyjnego oraz testowego. Na rysunku 8.2.4 przedstawiono wartości ciepła generowanego podczas krystalizacji stopów magnezu zamodelowanej na podstawie przedstawionej sieci neuronowej.

Z kolei zastosowano sieci neuronowe do wyznaczania wielkości ziarna odlewniczych stopów Mg-Al-Zn na podstawie stężenia masowego aluminium oraz szybkości chłodzenia. Do wyznaczenia wielkości ziarna na podstawie stężenia masowego aluminium oraz zastosowanej szybkości chłodzenia opracowano sieć jednokierunkową typu MLP o 2 neuronach w warstwie wejściowej. Dla zmiennych wejściowych i wyjściowych zastosowano technikę konwersji zmiennych mini-max. Liczba warstw sieci została określona jako trzy warstwy z 13 neuronami w warstwie ukrytej. Funkcje aktywacji w warstwie wejściowej i wyjściowej określono jako liniowe z nasyceniem, w przypadku warstwy ukrytej jako logistyczną, natomiast dla wszystkich warstw zastosowano liniowe funkcje PSP. Sieci uczono metodą wstecznej propagacji błędów (14 epok uczących).

W tablicy 8.2.3 przedstawiono wartości błędów, ilorazy odchyleń standardowych oraz współczynniki korelacji zaprojektowanych sieci neuronowych dla zbioru uczącego,

		Zbiór uczący		Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy			
Parametr	Architektura sieci	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona
Qc	MLP 2:2-7- 1:1	67,3	0,63	0,77	67,56	0,72	0,69	65,6	0,51	0,87

Tablica 8.2.2. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej wykorzystanej do wyznaczania wartości ciepła ukrytego generowanego podczas krystalizacji stopu



Rysunek 8.2.4. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia masowego aluminium na wartość ciepła (Q_c) wydzielanego podczas krystalizacji stopu

walidacyjnego oraz testowego. Rysunek 8.2.5 przedstawia wartości wielkości ziarna uzyskanych na podstawie przedstawionej sieci neuronowej. Opracowany model sieci neuronowej pozwala na określenie wielkości ziarna z błędem ±21,36 μm.

Sieci neuronowe zastosowano również do wyznaczania własności mechanicznych odlewniczych stopów Mg-Al-Zn na podstawie stężenia masowego aluminium oraz szybkości chłodzenia. Do tego celu wykorzystano sieci jednokierunkowe typu MLP o 2 neuronach w warstwie wejściowej. Dla zmiennych wejściowych i wyjściowych zastosowano technikę

			Zbiór uczący		Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy		
Parametr	Architektura sieci	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona
Ζ	MLP 2:2-13- 1:1	21,36	0,56	0,83	11,09	0,39	0,92	17,83	0,61	0,8

Tablica 8.2.3. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej wykorzystanej do wyznaczeniawielkości ziarna



Rysunek 8.2.5. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia aluminium na wielkość ziarna badanych stopów

konwersji zmiennych mini-max. Liczba warstw sieci została określona jako trzy warstwy z 6 neuronami w warstwie ukrytej dla sieci obliczającej twardość HRF, 8 neuronami w warstwie ukrytej dla sieci wyznaczającej wytrzymałość na ściskanie oraz 4 neuronami w warstwie ukrytej wyznaczającej umowną granicę plastyczności. Funkcje aktywacji w warstwach wejściowych

	2									
		Zb	Zbiór uczący		Zbiór walidacyjny			Zbiór testowy		
Parametr	Architektura sieci	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona	Średni błąd bezwzględny	Iloraz odchyleń	Korelacja Pearsona
HRF	MLP 2:2-6- 1:1	1,37	0,09	0,99	1,77	0,11	0,99	1,58	0,1	0,99
R_c	MLP 2:2-8- 1:1	7,88	0,39	0,92	5,66	0,32	0,94	6,92	0,4	0,91
<i>R</i> _{c0,2}	MLP 2:2-4- 1:1	8,72	0,39	0,91	6,74	0,34	0,94	13,15	0,37	0,96

Tablica 8.2.4. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej wykorzystanej do wyznaczaniawłasności mechanicznych



Rysunek 8.2.6. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia aluminium na twardość badanych stopów



Rysunek 8.2.7. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia aluminium na wytrzymałość na ściskanie R_c



Rysunek 8.2.8. Wpływ szybkości chłodzenia oraz stężenia aluminium na umowną granicę plastyczności $R_{c0,2}$

i wyjściowych określono jako liniowe z nasyceniem, w przypadku warstwy ukrytej jako logistyczną, natomiast dla wszystkich warstw zastosowano liniowe funkcje PSP. W tablicy 8.2.4 przedstawiono wartości błędów, ilorazy odchyleń standardowych oraz współczynniki korelacji zaprojektowanych sieci neuronowych dla zbioru uczącego, walidacyjnego oraz testowego. Wartości własności mechanicznych dla zaimplementowanych sieci neuronowych przedstawiono na rysunkach 8.2.6-8.2.8. Opracowane modele sieci neuronowych pozwalają na obliczenie, łącznie z możliwym błędem pomiarowym, poszczególnych wartości własności materiałowych, tj. twardości ±1,37 HRF, wytrzymałości na ściskanie ±7,88 MPa oraz umownej granicy plastyczności ±8,72 MPa.

8.3. Aplikacje sieci neuronowych do optymalizacji struktury i własności stopów Mg-Al-Zn

Dobór optymalnych warunków obróbki cieplnej dla badanych odlewniczych stopów magnezu przeprowadzono z wykorzystaniem analizy komputerowej, w tym sieci neuronowych.

Zastosowane sieci neuronowe pozwoliły na opracowanie modelu zależności pomiędzy:

- stężeniem aluminium, temperaturą i czasem przesycania, ośrodkiem chłodzącym, a twardością,
- stężeniem aluminium, temperaturą i czasem przesycania, temperaturą i czasem starzenia, a twardością.

Zbiór danych, dla przesycania i starzenia, podzielono w sposób losowy na trzy podzbiory: uczący, walidacyjny i testowy. W przypadku sieci obliczającej twardość po przesycaniu liczba przypadków wynosiła odpowiednio: 68, 20, 20, natomiast dla sieci obliczającej twardość po starzeniu: 231, 100, 101.

Dane ze zbioru uczącego wykorzystano do modyfikacji wag sieci, dane ze zbioru walidacyjnego do oceny sieci w trakcie procesu uczenia, natomiast pozostałą część wartości (zbiór testowy) przeznaczono do niezależnego określenia sprawności sieci po całkowitym zakończeniu procedury jej tworzenia. Wyniki wykorzystywane w procesie uczenia i testowania sieci poddano normalizacji. Zastosowano skalowanie względem odchylenia od wartości minimalnej zgodnie z funkcją mini-max. Funkcja mini-max transformuje dziedzinę zmiennych do przedziału (0,1). Rodzaj sieci, liczbę neuronów w warstwie (warstwach) ukrytej, metodę i parametry uczenia określono obserwując wpływ tych wielkości na przyjęte wskaźniki oceny jakości sieci [17]. Jako podstawowe wskaźniki oceny jakości modelu wykorzystano następujące wielkości:

- błąd średni prognozy sieci,
- iloraz odchyleń standardowych,
- współczynnik korelacji Pearsona.

Za istotny wskaźnik jakości modelu zbudowanego przy pomocy sieci neuronowej przyjęto iloraz odchyleń standardowych dla błędów i dla danych (tab. 8.3.1, 8.3.2) Poprawność przyjętego przez sieć modelu można rozważać tylko wtedy, jeżeli prezentowane przez sieć prognozy są obarczone mniejszym błędem niż proste oszacowanie nieznanej wartości wyjściowej. Najprostszym sposobem oszacowania wartości wyjściowej pozostaje przyjęcie wartości średniej z danych wyjściowych dla zbioru uczącego i przedstawianie jej jako prognozy dla danych nie prezentowanych podczas procesu uczenia. W tym przypadku błąd średni jest równy odchyleniu standardowemu dla wartości wyjściowej w zbiorze uczącym, natomiast iloraz odchyleń standardowych przyjmuje wartość jeden. Im mniejszy jest błąd predykcji sieci, tym

Wskaźniki oceny jakości	Zbiór danych						
modelu	uczący	walidacyjny	testowy				
Błąd średni, HRF	1,1	1,1	1,1				
Iloraz odchyleń standardowych	0,1	0,08	0,08				
Współczynnik korelacji	0,99	0,99	0,99				

Tablica 8.3.1. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej opracowanej do obliczania twardościpo przesycaniu

 Tablica 8.3.2. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej opracowanej do obliczania twardości po przesycaniu i starzeniu

Wskaźniki oceny jakości	Zbiór danych						
modelu	uczący	walidacyjny	testowy				
Błąd średni, HRF	1,5	1,5	1,5				
Iloraz odchyleń standardowych	0,09	0,09	0,09				
Współczynnik korelacji	0,99	0,99	0,99				

iloraz odchyleń standardowych przyjmuje mniejsze wartości, osiągając zero dla "idealnej" prognozy. Zarówno dla sieci obliczającej twardość po przesycaniu jak i starzeniu, jako optymalną ustalono sieć jednokierunkową typu MLP (perceptron wielowarstwowy) z jedną warstwą ukrytą i 5 neuronami w tej warstwie. Zastosowaną funkcję błędu oraz logistyczną funkcję aktywacji przyjęto w postaci sumy kwadratów wykorzystując metodę uczenia opartą na algorytmie gradientów sprzężonych, co pozwoliło na prezentację przykładów ze zbioru uczącego przez 101 epok treningowych dla sieci obliczającej twardość po przesycaniu i 195 epok dla sieci obliczającej twardość po starzeniu [17].

Na podstawie opracowanych modeli sieci neuronowych wykonano wykresy wpływu temperatury oraz czasu przesycania i starzenia, a także stężenia aluminium na twardość analizowanych odlewniczych stopów magnezu (rys. 8.3.1-8.3.8).

Otrzymane wyniki jednoznacznie wskazują, że najkorzystniejszym rodzajem obróbki cieplnej zarówno pod względem optymalnych warunków pracy oraz zużytej energii i czasu potrzebnych na przeprowadzenie przesycania i starzenia, jak i zarówno pod względem uzyskania najkorzystniejszych własności mechanicznych jest przesycanie w temperaturze 430°C przez 10 godzin i starzenie w temperaturze 190°C przez 15 godzin (tab. 8.3.3) [17].



Rysunek 8.3.1. Wpływ temperatury i czasu przesycania na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl12Zn1 przy założonej temperaturze i czasie starzenia 190°C i 15 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.2. Wpływ temperatury i czasu przesycania na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl9Zn1 przy założonej temperaturze i czasie starzenia 190°C i 15 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.3. Wpływ temperatury i czasu przesycania na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl6Zn1 przy założonej temperaturze i czasie starzenia 190°C i 15 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.4. Wpływ temperatury i czasu przesycania na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl3Zn1 przy założonej temperaturze i czasie starzenia 190°C i 15 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.5. Wpływ temperatury i czasu starzenia na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl12Zn1 przy założonej temperaturze i czasie przesycania 430°C i 10 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.6. Wpływ temperatury i czasu starzenia na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl9Zn1 przy założonej temperaturze i czasie przesycania 430°C i 10 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.7. Wpływ temperatury i czasu starzenia na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl6Zn1 przy założonej temperaturze i czasie przesycania 430°C i 10 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych



Rysunek 8.3.8. Wpływ temperatury i czasu starzenia na twardość odlewniczego stopu magnezu MCMgAl3Zn1 przy założonej temperaturze i czasie przesycania 430°C i 10 godzin; wyniki uzyskane przy pomocy symulacji komputerowej z wykorzystaniem sieci neuronowych

Oznaczenie stanu	Warunki obróbki cieplnej						
obróbki cieplnej	temperatura, °C	czas wygrzewania, h	sposób chłodzenia				
0 – odlany, bez obróbki	_	_	_				
1 – przesycony	430	10	woda				
2 – przesycony	430	10	powietrze				
3 – po obróbce cieplnej z chłodzeniem z piecem	430	10	piec				
4 – starzony	190	15	powietrze				

Tablica 8.3.3. Warunki obróbki cieplnej badanych stopów

Kolejnym przykładem wykorzystania sieci neuronowych jest modelowanie chropowatości i własności mechanicznych powierzchni stopów magnezu obrobionych powierzchniowo poprzez wtapianie laserowe. W celu wyznaczenia własności mechanicznych warstw wierzchnich po laserowej obróbce powierzchniowej przy zadanych: stężeniu masowym aluminium, szybkości wtapiania, mocy lasera oraz rodzaju wtapianych cząstek, posłużono się sieciami neuronowymi [17]. Podstawą oceny jakości sieci były trzy charakterystyki regresyjne: średni błąd bezwzględny, iloraz odchyleń standardowych oraz współczynnik korelacji Pearsona. Iloraz odchyleń standardowych jest miernikiem jakości modelu stosowanego do rozwiązywania problemów regresyjnych. Wyznaczany jest jako iloraz odchylenia standardowego błędów predykcji i odchylenia standardowego zmiennej wyjściowej. Mniejsza wartość miernika, odwrotnie proporcjonalna do wariancji, wskazuje na lepszą jakość predykcji.

W pierwszym przypadku zaprojektowano sieć neuronową obliczającą twardość na podstawie parametrów laserowego wtapiania. Do zaprojektowania posłużono się danymi eksperymentalnymi, uwzględniając rodzaj zastosowanego proszku, stężenie aluminium w stopie, moc lasera oraz prędkość wtapiania – jako zmienne wejściowe – oraz twardość HRF – jako zmienną wyjściową. Zbiór danych został podzielony na trzy podzbiory: uczący (48 przypadki), walidacyjny (23 przypadki) oraz testowy (24 przypadki).

W wyniku projektowania i optymalizacji wybrano sieć jednokierunkową typu MLP (perceptron wielowarstwowy) o 4 neuronach w warstwie wejściowej – odpowiadających zmiennym wejściowym: rodzaj zastosowanego proszku (zmienna nominalna), stężenie aluminium w stopie, moc lasera i prędkość wtapiania (zmienne numeryczne) oraz jednej numerycznej zmiennej wyjściowej (twardość HRF). Dla nominalnej zmiennej wejściowej zastosowano technikę konwersji Jeden-z-N, natomiast dla numerycznych zmiennych wejściowych oraz zmiennej wyjściowej zastosowano technikę konwersji zmiennych mini-max. Liczba warstw sieci została określona jako trzy warstwy z 2 neuronami w warstwie ukrytej. Funkcje aktywacji w warstwach wejściowej i wyjściowej określono jako liniowe z nasyceniem, a w warstwie ukrytej jako logistyczną, natomiast dla wszystkich warstw zastosowano liniowe funkcje PSP. Sieci uczono metodami wstecznej propagacji błędów (50 epok uczących) oraz gradientów sprzężonych (62 epoki uczące).

W tablicy 8.3.4 przedstawiono wartości błędów, ilorazy odchylenia standardowego oraz współczynniki korelacji zaprojektowanej sieci neuronowej, które to charakterystyki były podstawą oceny sieci.

Wskaźniki oceny jakości	Zbiór danych						
modelu	uczący	walidacyjny	testowy				
Błąd średni, HRF	5,35	6,49	5,90				
Iloraz odchyleń standardowych	0,43	0,44	0,46				
Współczynnik korelacji	0,90	0,90	0,89				

 Tablica 8.3.4. Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej opracowanej do obliczania twardości po wtapianiu laserowym

8. Aplikacje komputerowej nauki o materiałach w odniesieniu do stopów Mg-Al-Zn

Na podstawie opracowanego modelu sieci neuronowej wykonano wykresy wpływu mocy lasera, stężenia aluminium, a także rodzaju proszku wtapianego na twardość analizowanych



Rysunek 8.3.9. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na twardość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku TiC z prędkością wtapiania 0,75 m/min



Rysunek 8.3.10. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na twardość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku VC z prędkością wtapiania 0,75 m/min

odlewniczych stopów magnezu po laserowym wtapianiu (rys. 8.3.9-8.3.13) [17]. Zamieszczone wykresy w większości przypadków dotyczą prędkości przetapiania 0,75 m/min, odpowiedniej



Rysunek 8.3.11. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na twardość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku WC z prędkością wtapiania 0,75 m/min



Rysunek 8.3.12. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na twardość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku SiC z prędkością wtapiania 0,75 m/min

dla uzyskania optymalnej geometrii ścieżki laserowej. Otrzymane wyniki jednoznacznie wskazują, że najwyższą twardością charakteryzują się odlewnicze stopy magnezu MCMgAl12Zn1, w powierzchnię których wtapiano proszki TiC i WC z mocą lasera 2,0 kW i prędkością 0,75 m/min.



Rysunek 8.3.13. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na twardość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku Al₂O₃ z prędkością wtapiania 0,50 m/min

Analogicznie jak w przypadku sieci do obliczania twardości warstwy wierzchniej po laserowym wtapianiu, opracowano również sieć neuronową do obliczania chropowatości warstwy wierzchniej. Do zbudowania modelu sieci posłużono się danymi doświadczalnymi, uwzględniając rodzaj zastosowanego proszku, stężenie aluminium w stopie, moc lasera oraz prędkość wtapiania – jako zmienne wejściowe – oraz chropowatość R_a – jako zmienną wyjściową. Zbiór danych został podzielony na trzy podzbiory: uczący (61 przypadków), walidacyjny (22 przypadki) oraz testowy (22 przypadki). Podstawą oceny jakości sieci były trzy charakterystyki regresyjne: średni błąd bezwzględny, iloraz odchyleń standardowych oraz współczynnik korelacji Pearsona.

W wyniku projektowania i optymalizacji wybrano sieć jednokierunkową typu MLP (perceptron wielowarstwowy) o 4 neuronach w warstwie wejściowej – odpowiadających

zmiennym wejściowym: rodzaj zastosowanego proszku (zmienna nominalna), stężenie aluminium w stopie, moc lasera i prędkość wtapiania (zmienne numeryczne) oraz jednej numerycznej zmiennej wyjściowej (chropowatość R_a). Dla nominalnej zmiennej wejściowej zastosowano technikę konwersji Jeden-z-N, natomiast dla numerycznych zmiennych wejściowych oraz zmiennej wyjściowej zastosowano technikę konwersji zmiennych mini-max. Liczba warstw sieci została określona jako trzy warstwy z 5 neuronami w warstwie ukrytej. Funkcje aktywacji w warstwach wejściowej i wyjściowej określono jako liniowe z nasyceniem, w przypadku warstwy ukrytej jako logistyczną, natomiast dla wszystkich warstw zastosowano liniowe funkcje PSP. Sieci uczono metodami wstecznej propagacji błędów (50 epok uczących) oraz gradientów sprzężonych (59 epok uczących).

W tablicy 8.3.5 przedstawiono wartości błędów, ilorazy odchylenia standardowego oraz współczynniki korelacji zaprojektowanej sieci neuronowej, będące podstawą oceny sieci.

Wskaźniki osony jakośsi modalu	Zbiór danych						
w skazniki oceny jakości moueru	uczący	walidacyjny	testowy				
Błąd średni, HRF	1,99	1,68	1,53				
Iloraz odchyleń standardowych	0,42	0,41	0,42				
Współczynnik korelacji	0,91	0,91	0,91				

 Tablica 8.3.5.
 Wskaźniki oceny jakości sieci neuronowej opracowanej do obliczania

 chropowatości powierzchni po wtapianiu laserowym

Ponadto na podstawie opracowanego modelu sieci neuronowej wykonano wykresy wpływu mocy lasera, stężenia aluminium w stopie, a także rodzaju proszku wtapianego na chropowatość analizowanych odlewniczych stopów magnezu po laserowym wtapianiu (rys. 8.3.14-8.3.18).

Zamieszczone wykresy dotyczą w większości przypadków prędkości przetapiania 0,75 m/min, odpowiedniej dla uzyskania optymalnej geometrii ścieżki laserowej. Otrzymane wyniki jednoznacznie wskazują, że najmniejszą chropowatością otrzymanej kompozytowej warstwy wierzchniej odznaczają się stopy odlewnicze MCMgAl12Zn1, w powierzchnię których wtapiano proszki VC, WC z mocą lasera 2,0 kW i prędkością 0,75 m/min.

Umiejętność modelowania własności mechanicznych gotowych materiałów jest niezwykle cenna dla producentów i konstruktorów. Oznacza ona, bowiem dotrzymanie wymagań klientów odnośnie do jakości dostarczanych produktów. Modelowanie własności wiąże się również z korzyściami finansowymi, gdyż kosztowne i czasochłonne badania zostają zredukowane do niezbędnego minimum, czyli badań koniecznych do weryfikacji przewidywanych



Rysunek 8.3.14. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na chropowatość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku TiC z prędkością wtapiania 0,75 m/min



Rysunek 8.3.15. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na chropowatość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku VC z prędkością wtapiania 0,75 m/min

wielkości. W literaturze dostępnych jest wiele obliczeniowych modeli służących do przewidywania własności mechanicznych różnych gatunków materiałów, jednakże ich zastosowanie



Rysunek 8.3.16. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na chropowatość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku WC z prędkością wtapiania 0,75 m/min



Rysunek 8.3.17. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na chropowatość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku SiC z prędkością wtapiania 0,75 m/min

w przemyśle jest ograniczone z powodu wąskich zakresów stężeń poszczególnych pierwiastków stopowych lub do gatunków o ściśle określonych warunkach wytwarzania.



Rysunek 8.3.18. Wpływ stężenia aluminium i mocy lasera na chropowatość odlewniczych stopów magnezu po wtapianiu laserowym proszku $Al_2O_3 z$ prędkością wtapiania 0,50 m/min