

лінійної системи для нелінійних систем. Використання цієї моделі, незважаючи на складність рядів Вольтера, дає змогу розглядати різні наближення моделі нейрона – лінійну, нелінійні моделі різних порядків. Обчислення спектрів ядер Вольтера зводиться до розв'язування однотипних систем двох лінійних алгебраїчних рівнянь з двома невідомими.

Література

1. Gerstner W. Spiking Neuron Models. Single Neurons, Populations, Plasticity / W. Gerstner, W.M. Kistler. – Cambridge University Press, 2002. – 5,26 MB.
2. Kistler W. Reduction of the Hodgkin-Huxley Equations to a Single-Variable Threshold Model / W. Kistler, W. Gerstner, J. Leo van Hemmen // Neural Computation 9(5). – PP. 1015-1045.
3. Романишин Ю.М. Ряд Вольтера для моделі Ходжкіна-Хакслі нейрона / Ю.М. Романишин, Ю.Р. Кохалевич, С.Р. Пукіш // Моделювання та інформаційні технології : зб. наук. праць Ін-ту проблем моделювання в енергетиці ім. Г.Є. Пухова НАН України. – К., 2010. – Вип. 56. – С. 156-163.
4. Смердов А.А. Электрическая модель нейрона при одиночном возбуждении / А.А. Смердов, Ю.М. Романишин // Вопросы кибернетики: биомедицинформатика и ее приложения. – М. : Изд-во АН СССР. – 1988. – С. 168-174.

Романишин Ю.М., Павлыш В.А., Корж Р.О., Кохалевич Ю.Р., Пукиш С.Р.

Представление модели ФитцХью-Нагумо нейрона рядом Вольтерра

Рассмотрено представление модели ФитцХью-Нагумо нейрона рядом Вольтерра и особенности вычисления ядер Вольтерра для этой модели нейрона. Получены системы двух линейных алгебраических уравнений для спектров ядер Вольтерра и их решения. Для реализации обратного преобразования Фурье использован пакет прикладных программ Symbolic Math Toolbox системы MATLAB. Приведены графики модуля спектра и ядра первого порядка ряда Вольтерра.

Ключевые слова: нейрон, модель ФитцХью-Нагумо, ряд Вольтерра, спектр.

Romanyshyn Yu.M., Pavlysh V.A., Korzh R.O., Kokchalevych Yu.R., Pukish S.R. Representation of FitzHugh-Nagumo model of neuron by Volterra series

The representation of FitzHugh-Nagumo neuron model by Volterra series and features of calculation of Volterra kernels for this neuron model are considered. The systems of two linear algebraic equations for spectra of Volterra kernels and their solutions are obtained. Symbolic Math Toolbox of MATLAB system for inverse Fourier transforms is used. Diagrams of spectrum module and first order kernel of Volterra series are given.

Keywords: neuron, FitzHugh-Nagumo model, Volterra series, spectrum.

УДК 669.14.018.025

*Проф. З.А. Дурягіна, д-р техн. наук;
проф. Р.О. Ткаченко, д-р техн. наук; інж. О.Р. Ткаченко;
аспір. Н.В. Щербовських – НУ "Львівська політехніка"*

ОЦІНЮВАННЯ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНІ ПРОГРАМНИМИ ЗАСОБАМИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ

Виконано оцінювання відсутніх характеристик мікротвердості та термо-е.р.с. поверхні сталі після лазерного легування ніобієм та азотом методом заповнення пропусків із використанням нейромережних засобів. Обчислено похибки передбачених даних для відомих тестових значень.

Ключові слова: лазерне легування, мікротвердість, термо-е.р.с., штучний інтелект.

Вступ. Фізико-механічні характеристики поверхні є важливими у плані оцінювання експлуатаційних властивостей матеріалів, зокрема у проектуванні деталей машин хімічного машинобудування та теплоенергетичного обладнання. Здійснення достатньої кількості експериментів з метою отримання відповідних даних, неминуче пов'язане зі значними матеріальними і часовими затратами. Отже, достовірне передбачення невідомих властивостей для заданих вхідних характеристик, що може здійснюватися на основі доступної бази обмежених об'ємів, є важливим для галузі металознавства та створення матеріалів з наперед заданими властивостями і може забезпечувати відчутний економічний ефект.

Відомі підходи на основі застосування класичних методів і засобів математичної статистики та методів планування експерименту, а саме лінійний та нелінійний множинний регресійний аналізи, кореляційний аналіз [1]. Однак зазначені методи виявилися малоефективними для складних завдань, зокрема для вироджених задач, за наявності коротких вибірок даних, коли дані експериментів доповнювалися словесними висновками експертів. Розв'язок подібних задач потрібно шукати на шляху застосування засобів штучного інтелекту, зокрема штучних нейромереж, контролерів нечіткої логіки [2-5].

Постановка задачі. Розроблений метод оцінювання відсутніх експериментальних даних подамо на прикладі задачі створення матеріалів з наперед означеними властивостями. Ми розглядали таблиці даних, що описують результати вимірювання мікротвердості та термо-е.р.с. поверхні сталі 12X17T після лазерного легування ніобієм та азотом на CO_2 – лазері потужністю 800 Вт за швидкості сканування променя за поверхнею зразка 400 мм/хв. Однією з важливих характеристик легованого шару є його мікротвердість та фазовий склад, який опосередковано впливає на показники термо-е.р.с. Особливістю цієї задачі є можливе виникнення пропущених позицій у векторних даних (результатах вимірювання мікротвердості та термо-е.р.с.) у виконаному разовому експерименті. Пропуски не одиничні і можуть виникати в різних місцях, навіть у вхідних даних. Це пояснюється не тільки впливом людського чинника, але й умовами постановки експерименту, адже відстань між краєм зразка і центром відбитку індентора або між двома сусідніми відбитками повинна бути не менша ніж 2,0-2,5 діагоналі відбитку. Важливим є достовірне відтворення відсутніх даних, що дає змогу заощадити ресурси, необхідні для проведення повторних експериментів, а також отримати дані, які неможливо отримати, зважаючи на умови експерименту. Тому для відтворення повних даних, частина позицій задається, а частину необхідно оцінити. Назвемо вектором стану сукупність даних (мікротвердість, термо-е.р.с.). Отже, як показано вище, поставлена задача зводиться до відомої задачі заповнення пропусків у табличних даних.

Розв'язок задачі. Відомі методи заповнення пропусків у табличних даних, зокрема використання середнього арифметичного по стовпцях, метод К – найближчих сусідів, метод передбачення пропусків в окремому стовпці та ін. [6, 7]. Застосування зазначених методів для вирішення поставленого завдання, враховуючи природу і специфіку виникнення пропусків у наших даних, зокрема їх одночасна присутність у декількох різних позиціях, виявляється недостатньо ефективним.

Обираючи нейромережеві засоби заповнення пропусків у даних, зупинимося на варіанті нейропарадигми геометричних перетворень, перевагою якої є неітеративність та висока точність навчання [2-5]. Для задачі заповнення пропусків у даних використовуємо варіант нейроподібної структури геометричних перетворень в автоасоціативному режимі її застосування (рис. 1), де $x_1, x_i, \dots, x_m$ – вектор стану, а x_i – параметр, компонента вектора, x_n, i – n -й вектор, i – та компонента, $n = 1, 2, 3 \dots n$; $i = 1, 2, \dots, m$. Для виконання заданих функцій нейромережу необхідно навчити. У нашому випадку навчання виконується шляхом перетворень тренувальної матриці $X_{n, i}$, частину структури якої показано у табл. 1. Кожен рядок матриці відповідає реалізації, у відповідність якій ставимо певний гіпотетичний номер n . Усі реалізації, включно з тими, що вийшли за межі тренувальної множини – пронумеровані, починаючи від 1 до n .

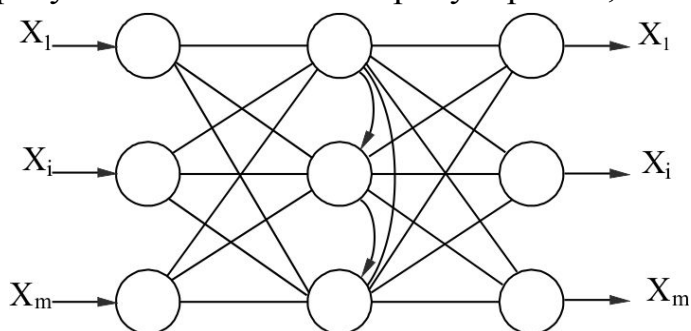


Рис. 1. Нейроподібна структура геометричних перетворень

Табл. 1. Частина структури тренувальної матриці

Вхід			Вихід
Глибина, мм	Мікротвердість, HV 0,2, ГПа	Мікротвердість, HV 1, ГПа	Термо-е.р.с., е 103 мВ/град
0,1	1,11	2,57	1,28
0,13	1,14	2,49	1,22
0,14	1,12	2,46	1,21
0,17	0,77	2,41	1,15
0,19	0,72	2,35	1,12
0,21	0,71	2,33	1,14
0,23	0,69	2,27	1,16

Кожен рядок матриці відповідає одному з входів або виходів. У процесі можуть додаватися нові стовпці матриці. Стовпці нумеруються $i = 1, 2, \dots, m$. Будь-який елемент матриці реалізацій видається як обчислене значення функцій двох змінних $F(n, i)$. Метою навчання є представити функції двох змінних $F(n, i)$ комбінацією функцій однієї змінної $f(n)$, $\varphi(i)$, які є шуканими аргументами функціями нейромережі. Спосіб розкладу функції $F(n, i)$ задає тип нейропарадигми, а сам розклад може здійснюватися по-різному.

У нашому випадку, коли елементи стовпців матриці $X_{n,i}^{(0)}$, що відповідають вихідним ознакам, є відомими для того, щоб представити функції $F(n, i)$ кінцевою сумою добутоків функцій однієї змінної. Послідовно виконуємо такі перетворення:

Приймаємо $j=0$.

Обираємо базовий рядок $X_{nb,i}^{(j)}$ серед рядків для $X_{n,i}^{(j)}$ (наприклад рядок, сума квадратів елементів якого є максимальною або ітераційний пошук базового рядка на основі заданого критерію оптимальності).

Від кожного з рядків тренувальної матриці віднімаємо базовий рядок, помножений на коефіцієнт, величина якого визначається з умови мінімуму різниці в сенсі критерію найменших квадратів:

$$X_{n,i}^{j+1} = X_{n,i}^{(j)} - K_{ln}^{(j)} \cdot X_{nb,i}^{(j)}, \quad (1)$$

$$K_{ln}^{(j)} = \frac{\sum_{i=1}^{ix+iy} (X_{n,i}^{(j)} \cdot X_{nb,i}^{(j)})}{\sum_{i=1}^{ix+iy} (X_{nb,i}^{(j)})^2}, \quad (2)$$

де: $n=1, n \max$; $i x$ – кількість вхідних ознак; $i y$ – кількість вихідних ознак; $n \max$ – кількість рядків тренувальної матриці.

За умови, якщо $j < i x + i y - 1$, збільшуємо j на одиницю і переходимо на пункт 2, якщо ні – завершуємо процедуру розкладу.

Ця процедура лежить в основі заповнення пропусків у таблиці даних, де кількість пропусків ортогональних перетворень, описаних вище, встановлюється автоматично, залежно від характеру взаємозв'язків між стовпцями таблиці, тобто компонентами векторів. На базі поданого алгоритму розроблено програмний продукт Expleo, який забезпечує заповнення пропусків різного походження у табличних даних як малих, так і великих розмірів.

Розв'язок нашої задачі заповнення пропусків здійснювався в такій послідовності:

1. Завантаження вхідних даних.
2. Вибір всіх рядків даних для використання в процедурі заповнення.
3. Автоматичне виявлення і виділення кольором пропусків у базі даних.
4. Формування відповідних тестових значень на підставі наявної таблиці для оцінки можливої точності заповнення пропусків (рис. 2, а). Для цього вибирали два останні стовпці вхідних даних і генерували 14 випадкових пропусків, що простягаються через обидва вибрані стовпці відповідно (рис. 2, б).

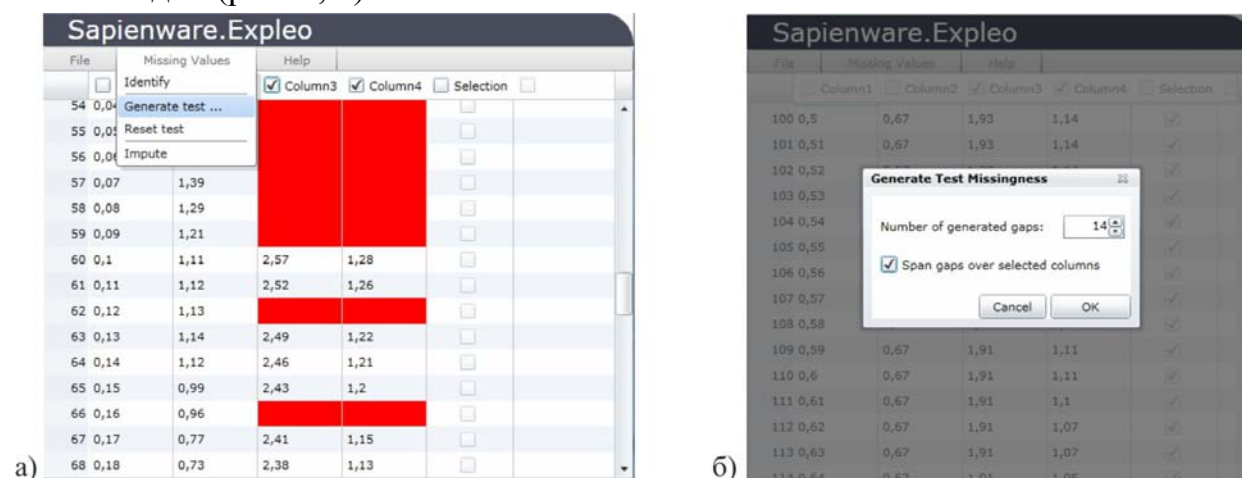


Рис. 2. Формування відповідних тестових значень:

а – генерація тестових пропусків; б – параметри генерації тестових пропусків

Така схема побудови відповідає характеру існуючих пропусків у даних.

Кількість таким чином створених тестових пропусків становить приблиз-

но 14 % від загальної кількості реалізацій, що відповідає співвідношенню реальних пропусків до загальної кількості векторів. Згенеровані випадкові тестові пропуски виділяли жовтим кольором.

5. Вибір всіх стовпців і запуск процедури заповнення пропусків.
6. Для параметризації заповнення пропусків поля "метод ініціалізації" і всі інші значення залишаємо встановленими за замовчуванням. Оцінюємо якість заповнення за представленою статистикою з використанням показника MAPE – середньою абсолютною похибкою у відсотках та RMSD – квадратом середньоквадратичного відхилення.

Скидання генерованих тестових даних. Остаточне генерування значень для заповнення, як описано вище, починаючи з пункту 5.

Запис даних для подальшого оброблення. Вважаємо, що надалі якість заповнення відповідає якості заповнення тестових даних (рис. 3).

Для порівняльної оцінки отриманих результатів було здійснено 10 експериментів, у яких випадково генерували тестові пропуски відповідно до характеристик справжніх пропусків, а потім їх заповнювали кожним із методів – середнім значенням стовпця, середнім значенням K найближчих сусідів і Expleo. Внаслідок отримано наступні усереднені значення похибок заповнення по кожному із стовпців з пропусками, які представлено в табл. 2.

	Column1	Column2	Column3	Column4	Selection
1	1,11	2,57	1,28		☒
2	0,11	1,12	2,52	1,26	☒
3	0,13	1,14	2,49	1,22	☒
4	0,14	1,12	2,46	1,21	☒
5	0,15	0,99	2,43	1,2	☒
6	0,17	0,77	2,41	1,15	☒
7	0,18	0,73	2,38	1,13	☒
8	0,19	0,72	2,35	1,12	☒
9	0,21	0,71	2,25	1,18	☒
10	0,22	0,7	2,3	1,15	☒
11	0,23	0,69	2,25	1,18	☒
12	0,25	0,69	2,23	1,21	☒
13	0,26	0,68	2,19	1,23	☒
14	0,28	0,67	2,17	1,21	☒

Рис. 3. Запис отриманих результатів

Табл. 2. Похибки заповнення тестових пропусків

Метод заповнення	MAPE HV 1	RMSE HV 1	MAPE e	RMSE e
Середнім значенням стовпця	0,08	0,20	0,03	0,05
Середнім значенням K найближчих сусідів	0,08	0,21	0,04	0,05
ПК Expleo	0,02	0,05	0,02	0,03

Встановлено, що якість заповнення стовпця із значеннями мікротвердості (HV1) методами заповнення середнім значенням стовпця, середнім значенням K найближчих сусідів істотно гірша за якість заповнення стовпця із значеннями термо-е.р.с. (e). Похибка MAPE для зазначених методів заповнення стовпця із значеннями мікротвердості перевищує заданий поріг точності вимірювання 0,05. Водночас, порівнюючи результати заповнення середнім значенням з результатами заповнення ПК Expleo на випадково генерованих пропусках, видно, що, на відміну від методу заповнення середніми значеннями і методу заповнення середнім значенням K найближчих сусідів, метод Expleo заповнює пропуски на рівні заданої точності вимірювання.

Внаслідок проведеного прогнозування відсутніх даних, що зумовлюються умовами експерименту, побудовано уточнену залежність мікротвердості та термо-е.р.с. від глибини легованого шару (рис. 4).

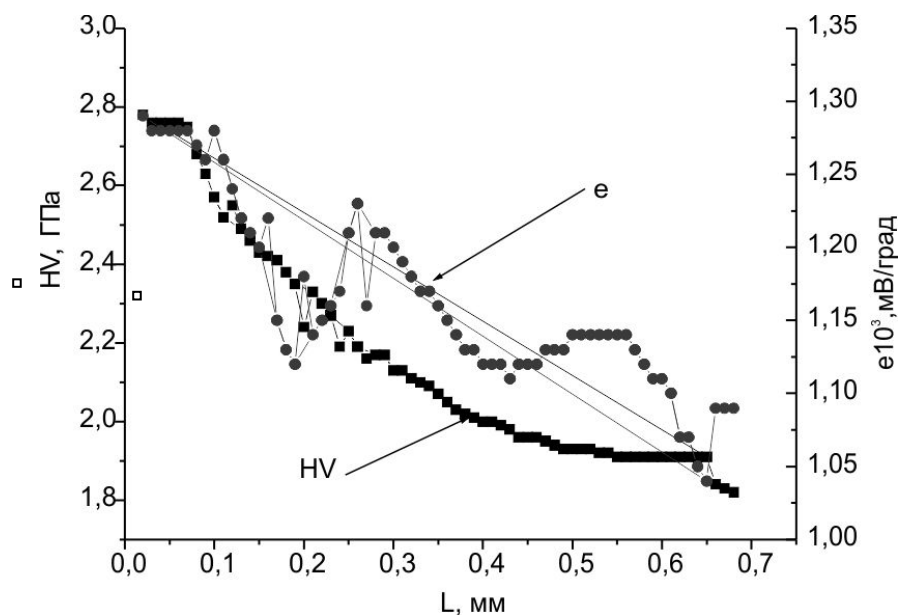


Рис. 4. Уточнений характер зміни мікротвердості та термо-е.р.с за глибиною легovanого шару на сталі 12X17T

За результатами проведених досліджень встановлено, що інтегральні значення мікротвердості поверхневого шару після лазерного легування становлять 2,57 ГПа, а його глибина – 0,25 мм. Уточнені дані термо-е.р.с. дають змогу стверджувати, що будова поверхні сталі 12X17T після лазерного легування – одношарова з нерівномірно розподіленими за глибиною шару карбідами та нітридами.

Висновки. Застосування нейроподібних структур автоасоціативного типу забезпечує автоматичне заповнення пропусків з точністю, яка є співмірною або допустимою для експериментальних досліджень. Показано, що точність прогнозування фізико-механічних властивостей методом ПК Expleo істотно вища порівняно з традиційними методами заповнення середніми значеннями та заповнення середнім значенням K найближчих сусідів. Заміна додаткових експериментальних досліджень нейромережевим моделюванням помітно зменшує вартість створення матеріалів з наперед означеними властивостями при збереженні припустимих у нашому випадку показників якості. Варто очікувати, що цей метод можна застосовувати для розв'язування інших задач металознавства.

Література

1. **Львовский Е.И.** Статистические методы построения эмпирических формул : учебн. пособ. / Е.И. Львовский. – М. : Изд-во "Высш. шк.". – 1982. – 224 с.
2. **Tkachenko R.** Geometrical data modelling / R. Tkachenko, P. Tkachenko, O. Tkachenko, J. Schmitz // Інтелектуальні системи прийняття рішень та прикладні аспекти інформаційних технологій : матер. наук.-практ. конф. – Т. 2. – Євпаторія, 2006. – С. 279-285.
3. **Искусственные нейронные сети.** Теория и практика. – 2-е изд. / В.В. Круглов, В.В. Борисов. – М. : Изд-во "Горячая линия-Телеком – 2002". – 382 с.
4. **Уоссермен Ф.** Нейрокомпьютерная техника: Теория и практика : пер. с англ. / Ф. Уоссермен. – М. : Изд-во "Мир", 1992. – 240 с.
5. **Пономарев С.** Нейронные сети / С. Пономарев // INFUSED BYTES OnLine. [Електронний ресурс]. – Доступний з <http://www.enlight.ru/ib/tech/neural/index.html>.
6. **Палис Ф.** Теория нейросетей / Ф. Палис, В.И. Калашников, И.В. Денисенко. – Магдебург, Донецк. – 2000. – 20 с.

7. Devijver P.A. On the edited nearest neighbor rule / P.A. Devijver and J. Kittler // in Proc. 5th Int. Conf. Pattern Recognit., Miami, FL, 1980. – PP. 72-80.

8. Brighton H. Advances in instance selection for instance-based learning algorithms / H. Brighton and C. Mellish // Data Mining Knowl. Disc, 2002. – Vol. 6. – PP. 153-172.

Дуригина З.А., Ткаченко Р.О., Ткаченко О.Р., Щербовских Н.В. Оценка физико-механических характеристик поверхности программными способами искусственного интеллекта

Проведена оценка отсутствующих характеристик микротвердости и термо-э.д.с. поверхности стали после лазерного легирования ниобием и азотом методом заполнения пропусков с использованием нейросетевых средств. Рассчитаны погрешности заполнения пропусков предусмотренных данных для известных тестовых значений.

Ключевые слова: лазерное легирование, микротвердость, термо-э.д.с., искусственный интеллект.

Duriagina Z.A., Tkachenko R.O., Tkachenko O.R., Shcherbovskykh N.V. The physico-mechanical properties measurement of surface with using of artificial intellect software

Was prognostication for lack the information of the surface microhardness and local t. – e.m.p. after laser alloying of Nb and N with methods of infill gaps, that base on the MNT in the program complex Expleo. Was lead the comparative valuation exactness of the prognostication.

Keywords: artificial intellect, laser alloying, microhardness, local t. – e.m.p.

УДК 537.226+537.311/0.1

Доц. М.М. Баран, канд. фіз.-мат. наук;

доц. І.М. Васькович, канд. екон. наук – НУ "Львівська політехніка"

ЕНЕРГІЯ ДНА ЗОНИ ПРОВІДНОСТІ У КРИСТАЛІ З КРАЙОВОЮ ДИСЛОКАЦІЄЮ ЗІ САМОУЗГОДЖЕНИМ ВРАХУВАННЯМ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Досліджено вплив самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу за різних значень концентрації електронів провідності на значення країв дозовлених зон (краю зони провідності $E_c(\rho, \theta)$) в околі крайової дислокації.

Ключові слова: електрон-деформаційний потенціал, концентрація електронів провідності, зона провідності, крайова дислокація.

Як показує огляд літератури з цієї проблеми [1-4], зонну схему напів-провідника *n*-типу (або *p*-типу) в околі дислокації розглянуто або в наближенні механіко-деформаційного потенціалу [1], або в наближенні електростатичного потенціалу поля екранованого заряду носіїв електричного струму, захоплених обірваними зв'язками на ядрі дислокації [5].

Щоб знайти аналітичний вигляд для енергетичного положення дна зони провідності $E_c(\rho, \theta)$, скористаємося результатом розв'язку самоузгодженої системи рівнянь, яку розглянемо для електрон-деформаційної моделі кристала з крайовою дислокацією [6-11]. Отже, під час розв'язування самоузгодженої системи було отримано вираз для положення дна зони провідності

$$E_c(\rho, \theta) = \lambda^0 + S\Delta U(\rho, \theta) - e\varphi(\rho, \theta) + V_c(\rho, \theta), \quad (1)$$