



# **חיזוי תכונות של סגסוגות באמצעות רשתות נוירונים מלאכותיות**

**מודל חישובי**

**מאת**

**עומרי גלס**

**יהונתן וולף**

**עבודה זו מוגשת כעבודה בהיקף של 2 יח' כמילוי חלקי של  
הדרישות לקראת קבלת ציון במדע חישובי**

**עבודה זו בוצעה בהדרכת איל כהן**

**יוני 2011  
ניסן תשע"א**

## מטרת הפרויקט

בפרויקט זה, שמהווה עבודת גמר כחלק מלימודי מדע-חישובי, אנו מתכוונים להשתמש ברשת נירונים מלאכותית בכדי לחזות תכונות של סגסוגות. בקצרה, סגסוגות מאופיינות לפי הרכבם ותכונותיהם, ואנו ננסה ליצור מודל חישובי שיצליח בתקווה לגלות קשר כלשהו בין מאפיינים אלו.

בעבודה כתובה זו נסביר בכלליות על המוח הביולוגי (שכן ממנו מגיע ההשראה למודל החישובי) ועל רשתות נירונים מלאכותיות כבסיס לפרויקט. נדבר כמובן גם על סגסוגות, ועל ניסיונות מחקריים בכיוון דומה לשלנו.

אנו מקווים שהפרויקט עצמו יהיה מעניין בכתיבתו, מקורי ברעיונו ומספק בתוצאותיו.

## תוכן עניינים

<b>1</b>	<b>מטרת הפרויקט</b>
<b>2</b>	<b>מבוא</b>
2	המוח הביולוגי
2	מבנה המוח האנושי ברמת המקרו
3	מבנה המוח האנושי ברמת המיקרו
3	הנוירון
4	תהליכי למידה במוח – כלל Hebb
5	רשת נוירונים מלאכותית
5	המבנה כהשראה מהביולוגיה
5	הסינפסות
5	עיבוד האות בנוירון
6	ארכיטקטורת הרשת
6	שימוש בווקטורים ומטריצות לחישובים ברשת נוירונים
8	תהליך למידה ברשת המלאכותית
10	סגסוגות
<b>12</b>	<b>מתודולוגיה</b>
12	שיטת הלימוד
12	מאגר נתונים
13	פירוט הקוד
13	הכרזה על פרמטרים
14	טעינת המאגר ועיבודו
15	אימון הרשתות
16	מבחן הרשת ועיבוד סטטיסטיקות
16	שיטות לחקירה
17	אישוש
<b>19</b>	<b>תוצאות</b>
<b>26</b>	<b>מסקנות ודיון</b>
26	סיבות אפשריות לשגיאה
26	רעיונות נוספים להרחבה
28	סיכום
28	מקווים שהפרויקט שלנו היה מעניין.
<b>29</b>	<b>ביבליוגרפיה</b>
I	רשימת איורים
II	רשימת תכונות והמספר הסידורי שלהן במאגר
IV	פורמט שמות קובץ בהם התוכנה משתמשת :

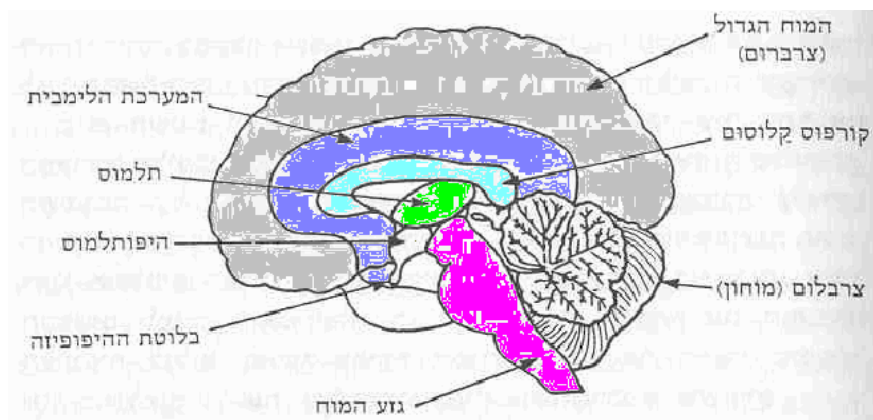
# מבוא

## המוח הביולוגי

המוח הוא איבר המצוי בגופם של בעלי חיים מפותחים והוא האיבר הראשי במערכת העצבים. הוא מבקר ומתאם את ההתנהגות, את פעילות החושים ואת רוב פעולת איברי הגוף וכן פונקציות מנטליות כגון למידה וזיכרון.

### מבנה המוח האנושי ברמת המקרו

נהוג לחלק את המוח האנושי כמורכב משלושה מוחות שהתפתחו בשלבים שונים בתהליך האבולוציה כאשר ישנם הבדלים במבנה והרכב ביניהם. חשוב להדגיש כי בעייתי לייחס פונקציות ספציפיות לחלקים ברורים בתוך המוח, וזאת מכיוון שלפעמים מדובר בפעילות מקבילה של מספר תחומים במוח שיוצרת את הפונקציה. אך אין זה אומר שלא הצליחו למפות אזורים שונים במוח בעלי קשר חזק וברור למגוון פונקציות, ועל כן נפרט על חלוקת המוח ברמת המאקרו.



איור I - מבנה המוח

### 3 המוחות-

במרכז המוח נמצא "גזע

**המוח**" או "המוח הזוחלי".

בחלק זה מתנהלים

פונקציות החיים הבסיסיות

כמו נשימה, דופק לב וכו'.

מוח הביניים או "המערכת

**הלימבית**" הוא המקום

המרכזי לניהול הרגשות

שניתן להגדירן כתוכניות

אוטומטיות לשליטה בפעולות חשובות להישרדות.

החלק האחרון הוא "קליפת המוח", שמכסה את רוב המוח ושם מתנהלים הפונקציות המורכבות

יותר. זהו אחד האיברים שמבדיל בני אדם מבעלי חיים אחרים.



איור II - חצאי המוח

המוח, במבנה, מחולק לשני חצאים (שמכונים המיספרות או

אונות), שמעורבים בתפקודים שונים (למשל, יצירה והבנה של

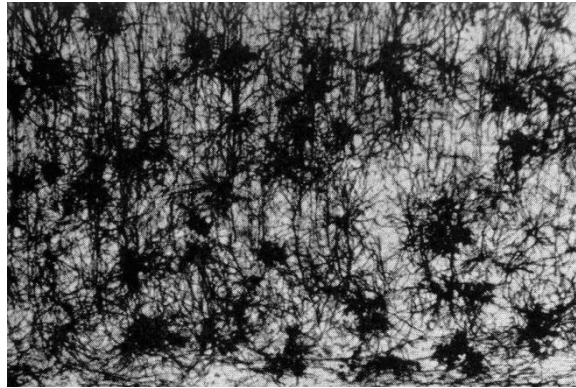
דיבור מרוכזים באונה השמאלית). כל אונה מעורבת בעיבוד חושי

ושליטה מוטורית של הצד ההפוך של הגוף (המידע שעין שמאל

קולטת מעובד באונה הימנית).

### מבנה המוח האנושי ברמת המיקרו

המוח מורכב מתאי גלייה ותאי עצב נוירונים. תאי הגלייה הם למעשה מעין דבק שמשמשים כשלד שנושא את הנוירונים. הנוירונים מהווים כ-10% מתאי המוח והם מבצעים את פעולות החישוב שאנו מכנים מחשבות, תחושות ורגשות. מספרם של הנוירונים במוח הוא כ-  $10^{10}$  עד  $10^{12}$ , והם מאורגנים במבנה של רשת בה כל נוירון מחובר ל-10 עד 10000 אחרים.



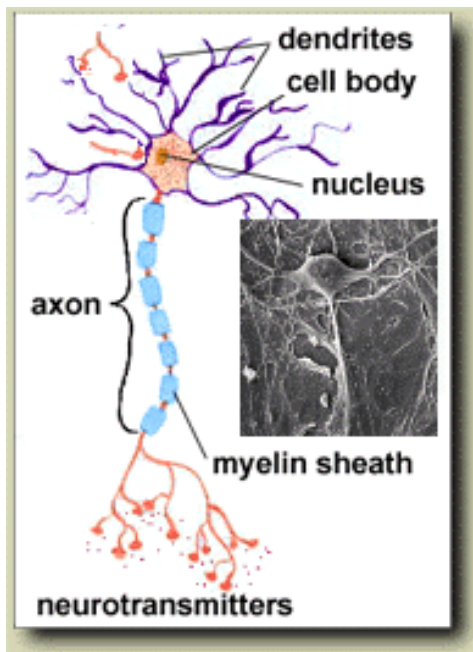
איור III - תמונת מיקרוסקופ של רשתות נוירונים במוח

### הנוירון

התא הנוירון מורכב מכמה חלקים שונים. בגוף התא מוכל הגרעין (בעל ה-DNA) ומנגנון משק האנרגיה התאי. מגוף התא יוצא סיב המכונה "אקסון" (axon) שדרכו מועברים האותות החשמליים לנוירונים השכנים. האקסון מתפצל לשלוחות שבסופן בליטות שמכונות "כפתורים סינפטיים". הקלט מגיע לנוירון דרך סיבים ששמהם "דנדריטים" (dendrites).

ברגע שסך האותות שנוירון מקבל, מהכפתורים הסינפטיים של נוירונים אחרים דרך הדנדריטים שלו, עובר סף מסוים – הנוירון יורה אות דרך האקסון שלו לכל הנוירונים שמחוברים אליו דרך הכפתורים הסינפטיים שלו. בין הנוירונים הקשורים אין מגע של ממש והמרווח, שבין קצה האקסון לדנדריט, שבו מועבר האות נקרא "סינפסה".

כל הנוירונים המתפקדים יורים ללא הפסקה ורק אלה שמתו מושבתים, אך רק כ-10% נוירונים יורים בקצב גבוה והשאר יורים באופן אקראי ובקצב נמוך. עוצמת האות שנוירון יורה נקבעת ע"י גורמים רבים שקשורים למבנה הנוירון היורה והנוירון המקבל ומבנה הסינפסה.



איור IV - נוירון

### תהליכי למידה במוח – כלל Hebb

למידה – שינוי התנהגות שמקורו בהתנסות והוא עמיד לאורך זמן.

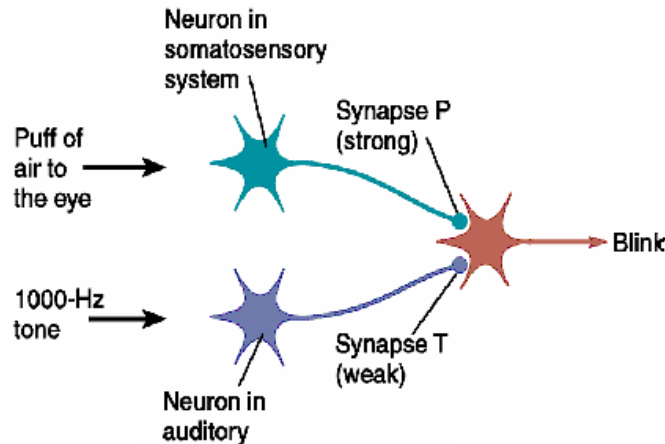
המוח מסוגל ללמוד, וזה מתרחש בזכות שינוי שקורה בטבעיות כחלק מהפעלת נוירונים.

כדי לבחון את התהליך נתמקד על דוגמא אילוף, סוג הלמידה הבסיסי ביותר.

אם נושפים אויר לתוך עין של אדם, הוא אוטומטית ימצמץ. ואם נושפים לתוך עינו של אדם ומיד

לאחר מכן משמיעים צפצוף, וחוזרים מספיק פעמים על התהליך – בסופו של דבר האדם ימצמץ גם

אם רק הושמע הצפצוף ללא הנשיפה. (איור 5)



איור V - למידה ברשת נוירונים

כאשר האות שמקבל הנוירון מצד שמאל עובר את הסף שלו, מופעלת תגובת המצמוץ. לנוירון המצמוץ

מחוברים שני נוירונים מצד ימין – העליון שולח אות דרך סינפסה חזקה כאשר יש תחושת אוויר

שנישף לעין, והתחתון שולח אות דרך סינפסה חלשה כאשר נשמע קול צפצוף.

בהתחלה סינפסה שמחברת בין נוירון הצפצוף לנוירון המצמוץ חלשה ולכן לא מספיק רק לשמוע את

הצפצוף כדי להפעיל את תגובת המצמוץ. לעומת זאת הסינפסה שמחברת בין נוירון תחושת האוויר

לנוירון המצמוץ מספיק חזקה שדי מנשיפה כדי לגרום לתגובת המצמוץ.

אבל ההפעלה של הסינפסה החזקה עם ההפעלה המיידית גם של הסינפסה החלשה גורמת להתפתחות

תהליכים ביולוגיים שגורמים לסינפסה החלשה להתחזק. לבסוף הסינפסה החלשה שמחברת בין

נוירון הצפצוף לנוירון המצמוץ, חזקה מספיק כדי לשלוח אות שלבדו עובר את הסף בנוירון המצמוץ.

לכן די בהשמעת הצפצוף והעין תמצמץ.

זהו תמצות של הכלל שגילה Hebb, שמתייחס ללמידה באמצעות חיזוק סינפסות וגם הוספת קשרים

סינפטיים חדשים.

## רשת נוירונים מלאכותית

### המבנה כהשראה מהביולוגיה

בפריקט שלנו אנו מתכוונים לרתום את כוח הלימוד שטמון שבמבנה החישובי של רשת הנוירונים בעזרת בניית מודל ממוחשב שיתבסס על מבנה זה. רשת הנוירונים המלאכותית הזאת תשמר מספר מאפיינים חשובים של הרשת הביולוגית – הסינפסות, עיבוד האות בנוירון הבודד, ארכיטקטורת הקשרים של הרשת. על עקרונות אלה נפרט כעת.

### הסינפסות

כפי שפורט קודם לכן במבנה הנוירון ביולוגי, הסינפסה היא המרווח בו מתבצע מעבר האות בין הנוירונים. עוצמת האות תלויה במספר מאפיינים כמו עובי "האקסון", מספר "השערים" בנוירון שמקבל וכו'. ברשת המלאכותית, הפרמטרים המאפיינים את הסינפסה מיוצגים ע"י הפרמטר  $W_{ij}$ , שיקרא המשקל הסינפטי. ככל שערך הפרמטר גבוהה יותר כך גם האות המועבר בין הנוירונים.

### עיבוד האות בנוירון

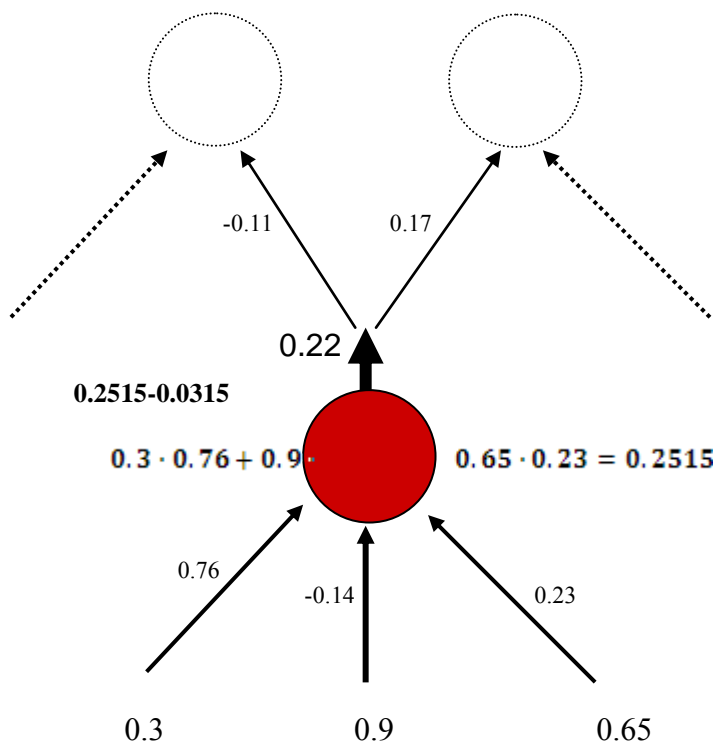
כפי שהוסבר קודם לכן, ברשת הנוירונים הביולוגית מועברים אותות חשמליים בין נוירון לנוירון. האות שנוירון מעביר הלאה תלוי באותות שקיבל. לכן, האות המועבר הלאה הוא תוצאה של עיבוד מסוים של האותות שנקלטו. האותות האלו מקודדים לפי מספר פולסים חשמליים או תדירותם. אבל בניגוד לרשת הביולוגית, במודל שלנו לא נשתמש ברצף אותות או תדירות אותות בין נוירונים. במקום

זאת קידוד האותות שלנו יהיה בינארי (0,1) או (0,1,-1) או ערכים שנמצאים בתוך תחום זה. עיבוד האותות יתבצע באופן הבא:

ערכי האותות הנכנסים יוכפלו במשקל הסינפטי בין הנוירון הפולט לקולט. האות השקול יהיה שווה בערכו לסך ערכי האותות שהוכפלו במשקלים. לאות השקול יתווסף ערך סף. אין קשר בין ערך זה לערך הסף של נוירון ביולוגי. מדובר בערך שיש לכל נוירון בנפרד שמתווסף לערך האות השקול. האות השקול החדש יועבד במה שנקרא "פונקציית מעבר". פונקציות המעבר תיבחר לפי גיוון אינפורמציית הפלט שלה, תלוי במה שאנחנו חפצים.

הסבר בעזרת דוגמא (ראה גם איור בעמוד הקודם) –

ערכי האותות נכנסים ששלוש נוירונים



איור VI - פעולת חישוב מתבצעת בנוירון

פולטים לאחד הם 0.65, 0.9, 0.3. המשקלים הסינפטיים בין הנוירונים הפולטים הם 0.23, -0.14,

0.76, בהתאמה. מכאן שערך הנוירון השקול הוא

$$0.3 * 0.76 + 0.9 * (-0.14) + 0.65 * 0.23 = 0.2515$$

עכשיו נוסיף את ערך הסף לאות השקול, שבמקרה שלנו יהיה -0.0315.

הערך החדש יהיה 0.22 ועליו תופעל פונקציית המעבר שבמקרה שלנו תהיה פונקציית sign. פונקציה

זו מחזירה 1 עבור ערכים חיוביים, 0 עבור ערך 0, (-1) עבור ערך שלילי. האות שבסופו של דבר נפלט

מהנוירון הוא 1, שכן 0.22 חיובי. האות הזה יועבר הלאה דרך המשקל הסינפטי לכל הנוירונים הבאים

ואותו תהליך חוזר על עצמו.

### ארכיטקטורת הרשת

ברשת הביולוגית מבנה הקשרים מסובך מאוד. אין ביכולתנו לפשט את המבנה הביולוגי ובמקום זאת

הרשת המלאכותית שלנו תורכב ממספר שכבות מוגדרות.

באיור נראה שיש 5 נוירונים בשכבת הקלט, 9 נוירונים בשכבת הביניים ונוירון אחד בשכבת הפלט. בין

שכבות הנוירונים יש שתי שכבות

של משקלים סינפטיים:  $W_1$

מכילה 45 קשרים  $(9 \times 5)$ ,  $W_2$

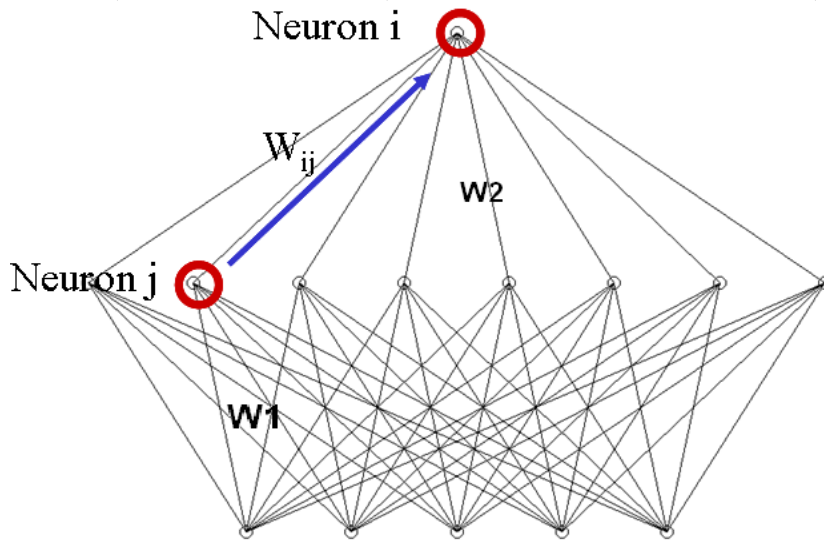
מכילה 9 קשרים  $(1 \times 9)$ .

בזכות מבנה זה אנו יכולים

להשתמש באלגברה של מטריצות

ווקטורים כדי לחשב את תהליכי

העיבוד.



איור VII - ארכיטקטורת רשת נוירונים

### שימוש בווקטורים ומטריצות לחישובים ברשת נוירונים

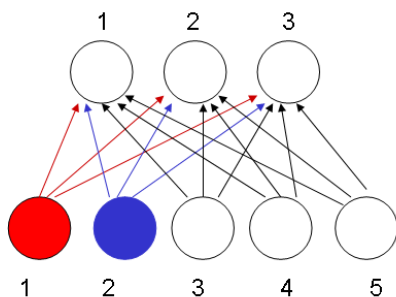
את כל המשקלים הסינפטיים נוכל לייצג במטריצה, כאשר כל עמודה במטריצה מייצגת את

המשקלים הסינפטיים שבקשרים שבין נוירון בשכבה תחתונה לבין כל הנוירונים שנמצאים בשכבה

העליונה, וכל שורה במטריצה מייצגת את המשקלים הסינפטיים של הקשרים בין נוירון בשכבה

העליונה לבין כל הנוירונים בשכבה התחתונה. מימדי המטריצה תלויים כמובן במספר ערכי הקלט

והפלט הרצויים.

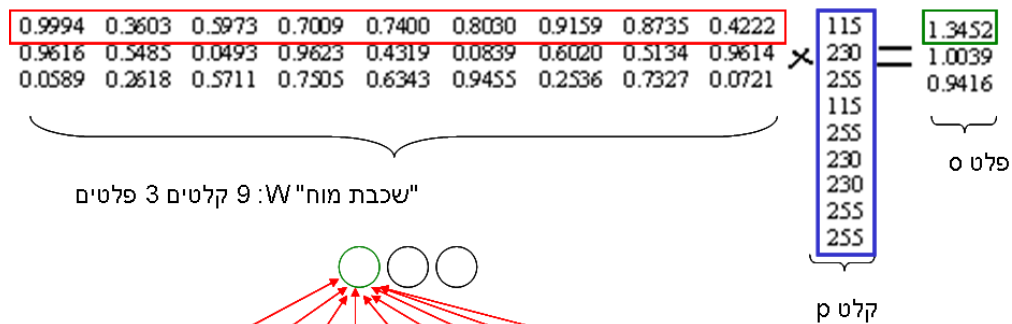


W11 W12 W13 W14 W15  
W21 W22 W23 W24 W25  
W31 W32 W33 W34 W35

איור VIII - קשרים סינפטיים בין נוירונים



את הקלט אנו נייצג כווקטור עמודה. בעזרת חוקי האלגברה של ווקטורים ומטריצות נוכל ע"י כפל מטריצה בווקטור לחשב באופן קומפקטי את האות השקול שכל נוירון מקבל בשכבה העליונה. הנה איור שמראה את החישוב:



איור IX - שימוש במטריצות להדמיית פעולת הרשת

הסבר החישוב - כפל מטריצה בווקטור למעשה דורש מכפלה סקלרית בין כל שורה מהמטריצה (W) לעמודה (P). כפי שנאמר קודם - שורה מהמטריצה בנויה מכל המשקלים הסינפטיים בין שכבת קלט לאחד הנוירונים מהשכבה העליונה. כאשר אנו מבצעים מכפלה סקלרית בין וקטור הקלט לשורה מהמטריצה, נקבל:

$$W_{1,1} * P_1 + W_{1,2} * P_2 + W_{1,3} * P_3 + \dots + W_{1,9} * P_9$$

זהו הסכום של סך האותות שהגיעו לנוירון הראשון בשכבה העליונה מכל הנוירונים בשכבה התחתונה. מכיוון שאותו תהליך קורה עם כל שורות המטריצה אנו למעשה מקבלים את האות השקול שמגיע לכל נוירון בשכבה העליונה, בצורה של ווקטור פלט.

## תהליך למידה ברשת המלאכותית

חלק עיקרי בתחום רשתות הנוירונים המלאכותיות הוא לימוד הרשת. מכיוון שרשתות שלנו הם למעשה מטריצות של ערכים שמייצגים קשרים סינפטיים וקבוצת ערכי סף, אנו צריכים למעשה למצוא את הערכים הנכונים שיתנו לנו את התשובות שאנו מחפשים.

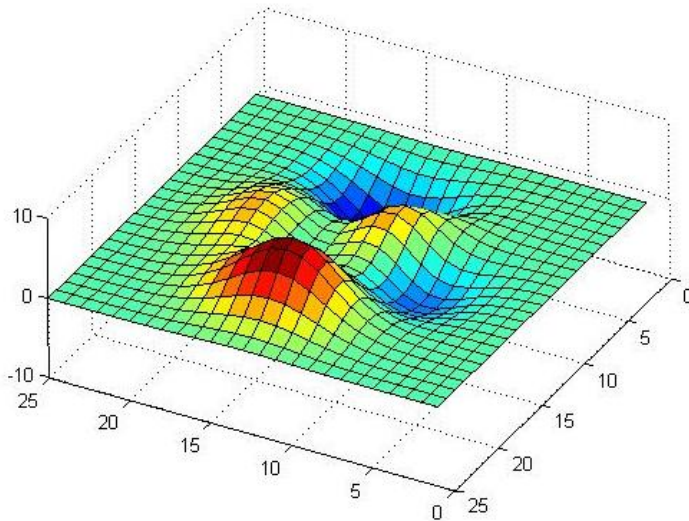
מכיוון שאין לנו יכולת לבא מהם הערכים הרצויים, המוחות נוצרים עם ערכים אקראיים. בעזרת החדרת הקלט למוח והשוואת הפלט שקיבלנו לפלט הרצוי, אנו יכולים לנסות לשנות את הערכים לכיוון הרצוי, בתקווה שאחרי מספיק ניסיונות נקבל מוח מספיק טוב. נפרט על התהליך:

הערכים  $W$  (מטריצת הקשרים הסינפטיים) ו- $B$  (ערך הסף) מיוצרים באופן אקראי. כפי שהוסבר קודם לכן על השימוש בחוקי המטריצות והוקטורים, את עיבוד הקלט  $P$  במוח אנו עושים כך:

$$A = \text{transfunc}(W * P + B)$$

כאשר  $\text{transfunc}$  היא פונקציית העיבוד הנוירון ו- $A$  היא הווקטור של ערכי הפלט מהמוח. אחרי

חישוב זה אנו משווים את פלט המוח  $A$  לפלט הרצוי  $T$ , תוך הגדרת טעות מינימאלית מקובלת. כאשר הפלט שקיבלנו מספיק קרוב לפלט הרצוי, או כאשר ההתאמה לנתונים<sup>1</sup> הופכת גדולה מדי מפסיקים את תהליך הלמידה. כחלק מהתהליך אנו משתמשים בערך שנקרא  $lr$  שמייצג את "קצב הלמידה". בעזרת ערך זה אנו נקבע בכמה לשנות את ערכי המוח. אך השיטה יחסית מסובכת (לכן נתמצת) – אנו מייצגים את שיטת



איור X - משטח למידה

חישוב הטעות  $E$  (במקרה שלנו – ממוצע ריבועי ההפרשים בין הפלט שהתקבל לרצוי) כפונקציה שתלויה במשתנים שהם ערכי המוח ( $W$  ו- $B$ ). אנו למעשה מחפשים לכל משתנה את הערך שייתן לנו את השגיאה המינימאלית, את הערך  $E$  המינימאלי. לכך אנו משתמשים בגרדיאנט (וקטור שרכיביו הם הנגזרות החלקיות של הפונקציה) מכיוון שהוא מראה את כיוון ותלילות השיפוע של משטח הפונקציה. אל הפונקציה אנו יכולים להתייחס כמשטח עקב היותה מורכבת ממספר משתנים, ואנו מחפשים על המשטח את האזורים הנמוכים ביותר. בעזרת הגרדיאנט אנו יודעים את כיוון "התנועה" לאורך ערכי המשתנים כדי להגיע לאזורים הנמוכים. גרדיאנט שלילי דורש הגדלת ערכים וגרדיאנט

<sup>1</sup>התאמה לנתונים נמדדת על ידי Validation Check. זוהי בדיקה שנועדה לוודא שהרשת יכולה להכליל – במצב בו היא למדה את הנתונים טוב מידי, היא לא תגיע לתוצאות טובות עם נתונים חדשים.

חיובי דורש הקטנת ערכים. מכאן שהשינוי בערכים ( $\Delta B$ ,  $\Delta W$ ) צריך להיות פרופורציוני לגרדיאנט השלילי.

כדי לשלוט על קצב הלמידה אנו מכניסים גם את הערך  $lr$  :

$$\Delta W = - lr * \frac{\partial B}{\partial W}$$

כל התהליך שבו מוחדר קלט למוח ונקבע שינוי המוח לפי הפלט נקרא *epoch*. כפי שנאמר קודם, תהליך הלמידה נפסק כאשר הרשת מצליחה להניב תוצאות ששגיתן מהערך הרצוי לא עולה על ערך קבוע מראש. אך כדי למנוע מצב שבוא ההרצה נמשכת לנצח (במקרה והרשת לא מצליחה להגיע לתוצאה הרצויה) או פשוט לא יותר מדי זמן, קובעים מראש מספר *epochs* מקסימאלי. כאשר הגענו למספר הזה תהליך הלמידה נפסק אוטומטית.

מכיוון שלערך  $lr$  יש השפעה גדולה על יכולת הלמידה של הרשת, אחת מדרכי הגברת היעילות של שיטת הלמידה היא התאמה רגישה יותר של ערך זה. ניתן לעשות זאת בעזרת הכלל הבא :  
כל פעם שערך השגיאה ב *epoch* גדול יותר מאשר בקודמו – מגדילים את קצב הלמידה, ולהיפך.

## סגסוגות

סגסוגת היא תרכובת של מספר יסודות, אשר לפחות אחד מהם הוא מתכת. לסגסוגת תכונות של מתכת, אשר משתנות לפי הרכיבים שלה. החומר הנוצר הוא לרוב שונה מאוד בתכונותיו מהחומרים המקוריים.

חלק מתכונות הסגסוגת נובעות באופן ישיר מהחומרים המרכיבים את הסגסוגת, כמו לדוגמא צפיפות, בעוד שאחרים נובעים מהקשרים בין האטומים השונים, כמו לדוגמא מאמץ המתיחה (Ultimate Tensile Strength).

תכונות הסגסוגות תלויות בעיבוד שעוברת הסגסוגת. אם יוצקים אותה לתוך תבנית בלחץ, היא תהיה חזקה וקשיחה יותר מאשר אם יוצקים אותה ללא לחץ. ההבדל מאוד גדול, כך שכיום אין כמעט סגסוגות ברמה מסחרית שנוצקות ללא לחץ.

התכונות של הסגסוגת מושפעות מאוד מהמרכיבים שלה: לפעמים, שינויים של חצאי אחוזים מספיקים על מנת לשנות את תכונות הסגסוגת באופן מהותי. מסיבה זו, קיימים מעט מודלים מתמטיים שמתארים תכונות של סגסוגת לפי החומרים שמרכיבים אותה. במילים אחרות, רוב הידע על תכונות של סגסוגות הוא מידע אמפירי, והוא נשמר על ידי המחזיקים בו לרוב כסוד מסחרי (כמעט ואין מאגרים חינוכיים של מאפייני סגסוגות).

בעבר, התפרסמו מספר מחקרים העוסקים בניסיון למדל תכונות של סגסוגות בעזרת מידע על ההרכב שלהן בלבד בעזרת רשתות נוירונים. המאמר הבולט ביותר, שנוצר ממחקר משותף<sup>(1)</sup> של ה-

ACRC (Advanced Casting Research Center) ו-NADCA (North Association)

(American Die Casting), עסק בניסיון ליצור מאגר מידע שיתבסס על מידע אמפירי ומחושב וימצא את התכונות של סגסוגות אלומיניום לפי המרכיבים שלהן ואת המרכיבים לפי התכונות.

תוצאת המחקר היא תוכנת *i-Select-Al* המכילה את מאגר המידע הזה. לתוכנה תוצאות די מדויקות, אך היא מצומצמת, ועוסקת באלומיניום בלבד. כמו כן, מצאנו מאמר נוסף<sup>(2)</sup>, העוסק אך ורק בסגסוגות טיטניום שהתרכזה בדיאגראמות טמפרטורה-זמן שדי הצליח לסגסוגות שבדקנו מספר תכונות, והרי הן לפניכם<sup>(3)</sup>:

**צפיפות (Density)** – משקל סגולי – היחס בין מסת החומר לנפחו.

**קשיחות (Hardness)** – מדד הבוחן עד כמה חומר עמיד לשינויים פלסטיים כשמפעילים עליו לחץ מתמשך מחפץ חד. יש כמה מדדים בעודה זו, ביניהם נופ (Knoop), ויקרס (Vickers), ברינל (Brinell) ורוקוול (Rockwell) למיניו.

**מאמץ מתיחה (Ultimate Tensile Strength)** – המאמץ המקסימאלי אותו חומר יכול לסבול בלי להימתח.

**(Yield Strength)** – גבול המאמץ אותו יכול חומר לסבול בלי לעבור שינויים פלאסטיים.

**מודול יאנג (Young Modulus)** – היחס בין הכוח ליחידת שטח לשינוי בממדי החומר. מהווה מדד לגמישות החומר. קשור ליחס פואסון ולמודול הגזירה בנוסחה קבועה.

**מאמץ דחיסה (Compressive Yield Strength)** – היכולת של החומר לעמוד בכוחות דוחסים

בלי לחוות שינויים פלסטיים.

**יחס פואסון (Poisson's Ratio)** – מבטא את היחס בשינוי הרוחבי בממדי החומר נגד השינוי

האורכי. נע לרוב בין 0.25 ו-0.5.

**(Machinability)** – מדד המתאר עד כמה נוח לעבוד עם החומר בעזרת מסורים או מחרטות.

**מודול גזירה (Shear Modulus)** – מודול המתאר את השתנות צורת החומר כתגובה לכוחות גזירה

– כשעל הפאה העליונה של החומר מופעל כוח מקביל לה, בעוד שעל הפאה התחתונה מופעל כוח מקביל לכיוון ההפוך.

**מאמץ גזירה (Shear Strength)** – מתאר את היכולת של חומר לעמוד בכוחות גזירה בלי להישבר.

**התנגדות חשמלית (Electrical Resistivity)** – מתאר באיזו עוצמה מתנגד חומר למעבר של

אלקטרונים דרכו.

**התרחבות בחום (CTE)** – מייצג את הגדילה ביחידת נפח למעלה.

**קיבולת חום סגולית (Specific Heat Capacity)** – מייצגת את ההתחממות (במעלות) כיחס של

האנרגיה ההופכת לחום.

**הולכת חום (Heat Conductivity)** – מייצגת את כמות החום המועברת בחומר, ליחידת בעקבות

הפרש טמפרטורות נתון.

**סולידוס (Solidus)** – הטמפרטורה בה כל מרכיבי הסגסוגת מוצקים.

**ליקוידוס (Liquidus)** – הטמפרטורה בה כל מרכיבי הסגסוגת נוזליים.

**מודול הנפח (Bulk Modulus)** – מודד את ההשתנות בנפח החומר כתלות בלחץ המופעל עליו מכל

הכיוונים.

## מתודולוגיה

### שיטת הלימוד

לצורך לימוד רשתות הניורונים, השתמשנו בכל המקרים בחלוקה של 30-70 של מאגר הנתונים. חלוקה זו לוקחת את כל הסטים של הלימוד ומחלקת אותם לשתי קבוצות: בקבוצה אחת יש 30 אחוז מהסטים (מדגם אקראי) והיא קבוצת הבוחן, ובקבוצה השנייה 70 אחוז מהסטים, והיא קבוצת הלמידה. המוחות מאומנים על סמך קבוצת ה-70%, ובסופו של דבר, על מנת לוודא שהם "למדו" ולא "זכרו" את התוצאות, בוחנים אותם על ה-30% הנותרים, ומתוכם מחשבים את אחוזי ההצלחה שלהם.

### מאגר נתונים

השלב הראשון בעבודתנו היה השגת מאגר הנתונים. המאגר שאנחנו צריכים יכול מידע בעל התאמה בין ההרכב של מספר מספיק גדול של סגסוגות לתכונות שלהן. לדוגמא, מאגר שמכיל רשומה (היפותטית) בה כתוב: אלומיניום 50%, מגנזיום 50%, קשיחות 200 MPa. אחרי פנייה לפקולטה להנדסת חומרים בטכניון ומחקר באינטרנט, מצאנו מאגר אחד חופשי לציבור באתר <http://www.matweb.com>. המאגר מכיל מידע על סגסוגות מסחריות – ספציפית, הוא נועד לקשר בין ספקים ולקוחות. אחרי אישוש של מספר סגסוגות בוחן ובדיקה באינטרנט, הגענו למסקנה שהוא אמין ברובו. על מנת להוריד את הנתונים מהאתר, השתמשנו בקוד PHP ש"מצלם" כל עמוד עם נתונים ושומר את הנתונים שבו בקובץ csv. לאחר מכן, השתמשנו בMatlab על מנת להפוך את המאגר לקובץ mat, כדי לחסוך זמן (רק בהרצה הראשונה צריך לקרוא את הקובץ הכבד). הפונקציה שעושה את זה נקראת read\_data.

### פירוט הקוד

הקוד מחולק למספר קבצים, כאשר הראשיים הם generate\_networks.m ו statistics.m. הקובץ הראשון משמש ליצירת המוחות, בעוד שהשני לעריכת הסטטיסטיקות. ניתן לשמור את תוצאות הראשון ולעבדן בשני מאוחר יותר.

### הכרזה על פרמטרים

מנקה את כל המשתנים הקיימים, וכולל את כל ההכרזות על כל הפרמטרים שהמשתמש יכול לשנות.

שם	תיאור	ברירת מחדל	סוג
hid_layer_size	גודל שכבה ראשונה	7	unsigned Integer
hid_layer_size2	גודל שכבה שנייה	2	unsigned Integer
trainfunc	פונקצית הלמידה	trainscg	Char vector
transfunc	פונקצית המעבר	logsig	Char vector
statistical_significance	מה המספר המינימאלי של סטים להם יש חשיבות סטטיסטית	20	unsigned integer
goalError	מה היא הטעות המינימאלית אחריה יש לעצור את הלמידה	0.0000005	Double
MAX_EPOCH	מה המספר המקסימאלי של תקופות למידה	1000	integer
perc	איזה חלק מהמאגר הופך לקבוצת הלימוד	0.7	Double
num_of_tests	מספר המוחות מהם נבחרים הטובים ביותר	30	unsigned integer
props	מספר התכונה אותה אנחנו חוקרים	8	unsigned integer
reinforced_element	המספר האטומי של היסוד אותו אנחנו חוקרים	29	unsigned integer
threshold	גבול (באחוזים) בין קבוצה א' לקבוצה ב'	50	double
edges	אחוז הערכים שנחשבים קצוות (15% מכל צד)	0.15	double

טבלה I - פרמטרי הרצה

### טעינת המאגר ועיבודו

בשלב זה, נטען מאגר הנתונים (מקובץ csv או .mat), ומעובד: מורידים ממנו את כל מה שמיותר – כפילויות, סטים עם מידע חסר וסטים עם מידע לא רלוונטי (לדוגמא, סטים בהם לא קיים היסוד הנבדק). לאחר מכן, המאגר מנורמל לפי הערך המקסימאלי של כל מטריצה. כמו כן, בערך זה נשארים רק הסטים שנכללים בקבוצה א', בהם ריכוז האלמנט הנבדק הוא קטן מ `threshold`. בחלק הזה שתי פונקציות:

#### שם הפונקציה: `read_data`

**מטרה:** עיבוד קובץ csv לתוך מטריצת הרכב ומטריצת תכונות.  
**משתני קלט:** שני וקטורי אותיות: מיקום הקובץ לקרוא ממנו ומיקום הקובץ לכתוב אליו.  
**משתני פלט:** שתי מטריצות, `t` ו `p`, בעלות אותו מספר של טורים.  
**דרך פעולה:** הפונקציה קוראת בעזרת `scanf` את הקובץ (כפי שנקבע ב `path`) לתוך `A cell array`. לאחר מכן, היא מפרקת אותו לשתי מטריצות – ימנית ושמאלית, כשהשמאלית מתארת באיזו שורה לשים את הערך והימנית באיזה ערך מדובר. הפונקציה נכנסת ללולאה ועוברת על כל שורה בשתי המטריצות – תוך שהיא מעבירה את הערכים למיקומים החדשים שלהם במטריצות `properties` ו `composition`. בתוך הלולאה, אם היא מגיעה לשורה ריקה, היא יוצרת `dataset` חדש (טור חדש במטריצות) ומכניסה את הערכים הבאים אליו (עד לשורה הריקה הבאה).

#### שם הפונקציה: `remove_duplicates`

**מטרה:** להסיר ערכים כפולים ממאגר, דרך חיפוש כפילויות במטריצת `p`.  
**משתני קלט:** שתי מטריצות, `t` ו `p`, בעלות אותו מספר של טורים.  
**משתני פלט:** שתי מטריצות, `t` ו `p`, בעלות אותו מספר של טורים.  
**דרך פעולה:** הפונקציה מתחילה בשתי לולאות מקוננות, שעוברות על כל סט ומשוות אותו לכל סט אחר. אם נמצא שווקטור מספר `i` שווה לווקטור מספר `j` (כל ערך בווקטור הראשון שווה לערך באותו מקום בשני), ווקטור `i` אינו רשום למחיקה, הוא רשום למחיקה את וקטור `j` ב `idxs`. לאחר מכן, הוא לוקח את כל הערכים המשמעותיים בווקטור `idxs` (כולם חוץ מהראשון, שתמיד שווה 0). בשלב זה, הוא יוצר וקטור חדש, `idxs3`, שכל הערכים בו שווים `true`, והופך את כל האינדקסים שמסומנים למחיקה (`idxs`) לערך `false`. כל שנותר לעשות הוא לקחת מ `p` ומ `t` את הטורים שמסומנים כ `true`, ולהחזיר אותם.



חלק זה של הקוד כולל לולאה, ומטרתו אימון רשתות הנוירוניים. הוא מתחיל במשפט תנאי, שמונע אימון הרשתות במקרה ואין לכמות הסטים חשיבות סטטיסטית.

שם הפונקציה: TrainTest1

מטרה: להסיר ערכים כפולים ממאגר, דרך חיפוש כפילויות במטריצת  $p$ .

משתני קלט: שתי מטריצות,  $t$  ו  $p$ , בעלות אותו מספר של טורים.

משתני פלט: שתי מטריצות,  $t$  ו  $p$ , בעלות אותו מספר של טורים.

דרך פעולה: הפונקציה מתחילה בשתי לולאות מקוננות, שעוברות על כל סט ומשוות אותו לכל סט אחר. אם נמצא שווקטור מספר  $i$  שווה לוווקטור מספר  $j$  (כל ערך בוווקטור הראשון שווה לערך באותו מקום בשני), ווקטור  $i$  אינו רשום למחיקה, הוא רשום למחיקה את ווקטור  $j$  ב  $idxs$ . לאחר מכן, הוא לוקח את כל הערכים המשמעותיים בוקטור  $idxs$  (כולם חוץ מהראשון, שתמיד שווה 0). בשלב זה, הוא יוצר וקטור חדש,  $idxs3$ , שכל הערכים בו שווים  $true$ , והופך את כל האינדקסים שמסומנים למחיקה ( $idxs$ ) לערך  $false$ . כל שנותר לעשות הוא לקחת מק ומ  $t$  את הטורים שמסומנים כ  $true$ , ולהחזיר אותם.

בחלק זה מעובדים הנתונים למידע סטטיסטי שימושי, והוא ממוקם ב-statistics.m. ככלל, הקובץ מחשב את טעות המוחות על קבוצה ב' – הסטים בהם ריכוז האלמנט  $\text{threshold} <$ , את הטעות בקצוות בנפרד מאת הטעות הכללית, ואז מציג את הטעות הממוצעת של קבוצה א', הטעות הממוצעת של קבוצה ב', הטעות הממוצעת בקצוות קבוצה ב', סטיית התקן בשלושתן, הטעות בחישוב האלמנט הטהור, סטיית התקן של ערכי התכונה ומספר הסטים.

### שיטות לחקירה

מכיוון שהפרויקט שלנו משתמש ברשת נזירונים, שינויים בדרך החקירה הם למעשה מיון לקלט ופלט. כלומר, אנו בוחרים איזה מידע אנו רוצים שהרשת תספק לנו באמצעות איזה נתונים שאנו מספקים לה, ומקווים להצלחה.

על מנת למצוא את הקשרים השונים בין המאפיינים של כל סגסוגת, ניסינו מספר דברים :

א. מציאת התכונות מתוך ההרכב (הרכב = קלט, תכונה = פלט). הכיוון הזה הוכיח את עצמו כמוצלח ביותר. לאחר שהרצנו אותו לכל תכונה אפשרית, מצאנו מספר קשרים, כמו לדוגמא הקשר המובן מאליו בין ההרכב לצפיפות וגם קשרים אחרים, כמו בין ההרכב למודול יאנג ויחס פואסון.

ב. מציאת ההרכב מתוך התכונות (הרכב = פלט, תכונות = קלט). כיוון זה הוכיח את עצמו כמאוד קשה : מפאת היקף מאגר הנתונים, התוכנה יצרה תרכובות שאינן מתכות ושלא ניתן לאשש אותן בלי ניסויים. מסיבה זו, לא המשכנו את החקירה בכיוון הזה.

ג. מציאת תכונות מתכונות. (תכונה א' = קלט, תכונה ב' = פלט). בשלב זה, ניסנו למצוא קשרים בין תכונות מסוימות לאחרות, בהנחה שאם ניתן לחשב תכונה מסוימת בדיוק טוב (בעזרת משוואות, גרפים או רשת הנזירונים שלנו), אולי אפשר להשתמש בה כדי למצוא תכונה אחרת (שהדיוק שקיים בשבילה פחות טוב). לדוגמא, ניתן למצוא בעזרת מקדם פואסון ומודול יאנג את מודול הנפח. כיוון זה עוד לא הוכיח את עצמו.

## אישוש

על מנת לאשש את השיטה שלנו, השתמשנו בדרך בת 2 שלבים, לאישוש של המאגר ושל נתונים חיצוניים.

בתור התחלה, בנינו מספר מוחות שהתאמנו על יסוד אחד **אז ורק** בסגסוגות בהן היסוד קיים בריכוז קטן יחסית (קטן מ-50%, קבוצה א') ורק על תכונה אחת של הסגסוגת – מודול יאנג. היסוד שבחרנו (בתור התחלה) הוא אלומיניום, מכיוון שיש עליו המון מידע במאגר שלנו. לאחר האימון, חישבנו את ערך מודול יאנג של אלומיניום טהור (100%) והשוונו אותו לערך הקיים בספרות[1]. בשלב זה, הטעות הממוצעת נעה בין כ-30% ל-0.3%. הסיבה לשימוש בסגסוגות בעלות ריכוז אלומיניום נמוך היא שהמוח לא ילמד על סגסוגות שקרובות מאוד ליסוד הטהור (לדוגמא 92%).

על מנת לבחור את המוח הכללי ביותר מבין המוחות האלה, הרצנו את המוחות על שאר סגסוגות האלומיניום (ריכוז אלומיניום < 50%, קבוצה ב'), ובחרנו את זה שממוצע הטעויות הממוצעות שלו הוא הקטן ביותר בתור "הכי כללי". מדד זה מחושב לפי הטעות הממוצעת בקבוצת הבוחן, הטעות הממוצעת בקבוצה ב' והטעות הממוצעת בקצוות (כפי שנראה למטה).

בשלב זה, רצינו לבדוק עד כמה המוח באמת יעיל בעבודתו. לקחנו את הערך הממוצע של מודול היאנג של קבוצה ב' וחישבנו בעזרתו "טעות ממוצעת", קרי, במקום להשוות את הערך האמיתי של מודול יאנג לכל סגסוגת את הערך שמחושב על ידי המוח, השוונו אותו לערך הממוצע של כל הסגסוגות. במצב זה, הטעות הממוצעת של המוח הייתה יותר גבוהה מהטעות המחושבת בעזרת ערך ממוצע אחיד. במילים אחרות, "עדיף" לקחת ערך ממוצע של מודול יאנג מאשר לחשב אותו בעזרת המוח שיצרנו.

בשביל לפתור את המצב הזה, הסתכלנו על סטיית התקן של קבוצה ב'. במקרה של אלומיניום, היא נמוכה מאוד – 2.2791. מסיבה זו, החלטנו לעבור לנחושת, ברזל ומגנזיום, עליהן יש מספיק נתונים ובהן סטיית התקן היא 13.5731, 6.9409 ו-1.0996 בהתאמה. כלומר, הנתונים במקרים אלה מגוונים במידות שונות ויאששו או יפריכו את התיאוריה.

גם אחרי המעבר, עדיין המוחות חישבו בצורה "פחות יעילה" את הטעות הממוצעת (בקבוצה ב'), כשסטיית התקן עדיין יותר טובה לערך הממוצע מאשר למוח. הדבר נובע מכך שרוב הנתונים עדיין מתרכזים מסביב לערך הממוצע, ומסיבה זו, החלטנו שעדיף לעשות ממוצע של ערכי הקצה, שיראה את גמישות המוח לפעול על תחום רחב של ערכים. חילקנו את קבוצה ב' לשתי תתי קבוצות, 15% נמוכים ו-15% גבוהים, ועשינו ממוצע של הערך הממוצע של שתי הקבוצות, הוא הממוצע בערכי הקצה:

קבוצה ב' טעות בקיצונים (15 15)		קבוצה ב'						האלמנט הטהור	קבוצה א' (למידה)			יסוד
טעות ממוצעת ערך נתון נגד ערך חציון (%)	טעות ממוצעת ערך נתון נגד ערך מחושב (%)	סטיית תקן של אותה טעות	טעות ממוצעת ערך נתון נגד ערך חציון (%)	סטיית תקן של אותה טעות	טעות ממוצעת ערך נתון נגד ערך מחושב (%)	סטיית תקן של ערכי מודול היאנג לקבוצה	מס' ערכים	טעות נגד ערך מחושב (%)	סטיית תקן לטעות	טעות ממוצעת (%)	מס' ערכים	
4.2695	5.0892	2.3013	2.2355	8.2451	3.9247	2.2791	85	2.1488	3.8563	4.0665	124	Aluminium, Al (13)
4.2889	4.1391	4.2777	1.9206	4.8116	2.4785	6.9409	277	4.7358	9.0434	6.2323	292	Iron, Fe(26)
20.1721	18.3036	10.3561	9.1627	16.7574	16.4308	13.5731	189	3.0874	4.8293	4.5455	160	Copper, Cu (29)
2.0238	9.6061	2.8855	0.6141	4.8436	6.7016	1.0996	41	3.7010	4.1185	3.6008	87	Magnesium, Mg (12)

טבלה II - השוואת תוצאות הערכת מודול היאנג בארבעה יסודות (לכל יסוד מוח אחד)

כפי שניתן לראות, השיטה שלנו פועלת טוב (באופן יחסי) בכך שהיא מצליחה לחשב בדיוק רב את מודול היאנג של היסוד כשהיא מתבססת אך ורק על קבוצה א' לשלב הלימוד. כמו כן, ניתן לראות שבשביל **ברזל ונחושת** היא לא פחות טובה מהממוצע לחישוב ערכי קצה של קבוצה ב' (ואף טובה יותר).

הסיבה לחוסר ההצלחה באלומיניום ומגנזיום נובעת, כנראה, ממיעוט הפריטים בקבוצה א' ומסטיית התקן הנמוכה של מודול היאנג בקבוצה זו, מה שמביא לכך שרוב הערכים קרובים מאוד לחציון. יש להזכיר שהתוצאות אינן הטובות ביותר, אלא רק התוצאות איתן ניתן לאשש את המודל – את המוח הטוב ביותר יש ליצור מלמידה על כל המאגר, ולא על קבוצה א' בלבד.

## תוצאות

בחלק הזה של העבודה נציג לכם את חלק מן התוצאות של העבודה שלנו. הסיבה שאנו מראים רק חלק היא עקב הכמות הגדולה מאוד של תוצאות, שאת כולן אפשר למצוא עם הקבצים המצורפים לעבודה הכתובה. כאן נראה לכם את ניתוח הביצועים של הרשתות ל-18 תכונות ל-6 יסודות (מגנזיום, אלומיניום, מנגן, ברזל, ניקל ונחושת). במקרה זה, לא השתמשנו בקבוצות א' וב' אלא רק בקבוצות למידה ובוחן, על מנת לוודא שהרשתות לומדות בצורה הטובה ביותר ולא על נתונים חלקיים. ישנן מספר עמודות בטבלת התוצאות:

1. מספר הסטים אותם הרשתות למדו (מדובר כאן בגודל קבוצת הלמידה עקב חלוקת המאגר לקבוצת למידה וקבוצת בוחן). מספר זה חשוב שכן מספר מצומצם מדי של סטים יקשה על תהליך הלמידה של הרשתות. מכאן שנוכל לחפש קשר בין ביצועי הרשתות לגודל מאגר הלמידה.
2. הטעות הממוצעת של הרשתות בעת הלמידה. מכיוון שתהליך הלמידה נגמר כאשר הרשתות מגיעות למצב שהן מתעצבות לפתרון המאגר הספציפי ומאבדות את כוחן בפיתרת מאגרים שונים – הטעות כאן שונה מהטעות שהוגדרה כטעות המינימאלית הרצויה. לכן אנו מעוניינים לראות את הטעות אליה הגיעה הרשת בסוף תהליך הלמידה. מדובר כאן למעשה בניסוי הרשת על קבוצת הבוחן.
3. סטיית התקן של הטעות הממוצעת של הרשתות בעת הלמידה. חשוב לראות עד לאן מגיעות שגיאות הרשת ולא רק את הטעות הממוצעת של כל הטעויות.
4. סטיית התקן של נתוני התכונות במאגר. חשוב לראות את טווח הנתונים של המאגר כדי לשפוט לנכון את הצלחת הרשת. ככל שהסטייה נמוכה יותר, אנו מצפים מן הרשת להצליח יותר שכן עליה לפלוט ערכים דומים מאוד לממוצע. הצלחה בקבוצת הבוחן יחד עם סטיית תקן גבוהה מצביעים על רשת יעילה.
5. טעות נגד חציון – טעות זו משמשת על מנת לבדוק מה היה אחוז השגיאה של הרשת במקרה בו הייתה מוציאה ערך קבוע השווה לחציון. במקרה והטעות הזו נמוכה מהטעות בלמידה, הרשת פחות יעילה מאשר השוואה לחציון.
6. סטיית התקן שלו משמשת כנתון נוסף להשוואה – גם אם הטעות נגד החציון קצת יותר טובה מהטעות בלמידה, כל עוד סטיית התקן של השנייה טובה יותר היא יעילה יותר מההשוואה לחציון.
7. טעות הרשת בקצוות – מייצג את טעות הרשת על 15% הסטים בהם ערך התכונה נמוך ועל 15% הסטים בהם ערך התכונה גבוה. משמש כמדד נוסף להשוואה בין הרשת לחציון – אם הוא נמוך יותר מההשוואה המקבילה בחציון (בעמודה הבאה) הוא בהכרח טוב ממנו. כמו כן, משמש כמדד לכלליות הרשת – ככל שהוא יותר נמוך, הוא מראה שהיא הצליחה על כל טווח הערכים האפשרי. דבר זה יאפשר לנו לסמוך יותר על תוצאות הרשת באשר הן.
8. טעות נגד החציון בקצוות – אותו דבר כמו בעמודה הקודמת, רק שכאן מדובר בהשוואת 15% הסטים בקצוות למצב בו הרשת הייתה פולטת את ערך חציון המאגר. מדובר כאן במדד להשוואה לעומת הרשת במקרה שתוצאות הטעות הממוצעת וסטיית התקן אינן חד משמעיות.
9. טעות 5 הרשתות הטובות ביותר – משתמש בתוצאות של 5 הרשתות הטובות (כפי שנקבעו לפי המדד שמופיע באישוש) ועושה ממוצע של התוצאות שכל אחד מהן נתנה, ומשווה את זה למאגר הכולל (שתי הקבוצות). ההשוואה כאן מתבצעת על מנת למצוא את הדרך היעילה ביותר לחשב את תכונת הסגסוגת: דרך מוח אחד או מספר מוחות.



שם התכונה	שם היסוד	מספר הסטים עליהם הרשת למדה	הטעות הממוצעת בעת הלימוד (הטעות בקבוצת הבוחן)	סטיית התקן של הנתון הקודם	סטיית התקן של נתוני התכונה במאגר	טעות נגד חציון	סטיית התקן של הנתון הקודם	טעות הרשת בקצוות	טעות נגד החציון בקצוות	5 טעות הרשתות הטובות
Hardness , Brinell	Magnesium, Mg 12	88	30.94	25.36	32.41	38.93	42.42	56.74	83.29	31.32
	Aluminum, Al 13	139	40.12	76.53	89.29	65.88	95.99	54.70	150.10	34.33
	Manganese, Mn, 25	254	33.75	35.91	93.26	79.14	114.74	28.91	174.62	28.83
	Iron, Fe 26	296	39.38	52.93	100.47	117.86	325.43	47.67	293.11	32.36
	Nickel, Ni 28	144	36.78	30.60	114.63	106.26	326.47	40.46	231.33	26.55
	Copper, Cu, 29	169	37.92	31.28	75.27	70.79	167.67	56.70	179.82	35.87
Hardness , Knoop	Magnesium, Mg 12	57	15.17	16.31	32.07	20.26	13.41	20.31	36.13	13.19
	Aluminum, Al 13	69	23.82	18.70	106.80	35.73	23.47	16.87	60.88	14.86
	Manganese, Mn, 25	205	21.01	21.88	102.01	42.11	48.19	24.93	90.09	19.89
	Iron, Fe 26	220	23.98	22.48	107.18	39.42	43.66	26.81	85.01	21.36
	Nickel, Ni 28	95	24.55	20.33	121.35	52.57	58.96	19.98	111.15	20.07
	Copper, Cu, 29	68	20.07	14.38	101.56	28.26	20.71	23.85	52.71	15.70
Hardness , Vickers	Magnesium, Mg 12	54	20.43	18.84	30.62	21.51	13.42	19.46	37.22	14.26
	Aluminum, Al 13	67	18.37	13.36	106.17	38.71	23.83	14.49	64.83	14.42
	Manganese, Mn, 25	204	20.18	18.85	100.61	46.21	58.34	29.50	101.20	22.26
	Iron, Fe 26	224	23.65	18.56	106.36	43.72	53.98	33.36	96.07	24.80
	Nickel, Ni 28	99	21.28	15.11	115.65	49.50	57.95	24.58	111.44	21.23
	Copper, Cu, 29	72	20.71	16.09	98.32	31.33	20.74	23.11	55.95	18.45

29.05	80.64	59.20	43.02	36.63	116.76	33.18	34.65	98	Magnesium, Mg 12	Tensile Strength, Ultimate
29.46	204.33	37.97	165.68	89.02	351.22	27.27	30.74	194	Aluminum, Al 13	
28.29	139.62	32.44	87.23	61.77	323.11	27.08	30.96	322	Manganese, Mn, 25	
32.58	218.65	39.49	237.36	86.01	338.43	36.45	39.07	441	Iron, Fe 26	
24.92	147.14	23.88	135.54	65.49	347.97	26.63	28.26	257	Nickel, Ni 28	
30.64	204.55	47.16	220.36	80.42	226.29	29.29	33.01	320	Copper, Cu, 29	
43.42	106.02	85.57	55.41	49.06	113.02	48.49	44.25	94	Magnesium, Mg 12	Tensile Strength, Yield
48.00	204.37	76.03	211.16	89.08	295.20	65.24	55.05	182	Aluminum, Al 13	
41.72	145.59	47.64	90.73	64.61	269.32	31.97	44.79	328	Manganese, Mn, 25	
54.89	211.10	81.34	265.68	85.33	284.80	66.60	56.94	429	Iron, Fe 26	
43.58	124.24	56.31	62.78	61.17	301.67	45.39	47.15	262	Nickel, Ni 28	
60.93	176.79	121.76	197.12	76.57	180.19	89.74	62.97	312	Copper, Cu, 29	
68.51	210.65	130.48	136.71	93.81	8.25	62.08	75.49	95	Magnesium, Mg 12	Elongation At Break
76.04	277.73	168.11	222.49	107.38	14.28	112.59	76.07	191	Aluminum, Al 13	
66.43	239.21	152.75	246.42	92.64	15.00	107.99	54.87	322	Manganese, Mn, 25	
74.21	216.71	163.63	238.63	86.18	16.03	474.95	104.96	440	Iron, Fe 26	
73.42	287.29	154.22	301.48	111.58	16.59	75.43	55.58	261	Nickel, Ni 28	
101.19	350.12	216.79	309.96	135.45	17.37	442.69	100.04	323	Copper, Cu, 29	
1.73	35.30	2.35	24.47	20.60	15.90	2.43	2.31	89	Magnesium, Mg 12	Young Modulus
3.44	52.16	3.33	22.18	28.06	44.03	5.81	4.60	146	Aluminum, Al 13	
2.98	127.85	2.06	99.33	63.35	60.33	14.89	3.94	317	Manganese, Mn, 25	
4.17	139.30	4.50	143.45	69.17	58.57	15.14	5.19	397	Iron, Fe 26	



6.57	198.27	8.55	170.71	84.22	62.92	14.07	8.73	208	Nickel, Ni 28	
4.59	100.39	6.00	82.42	44.72	40.64	17.39	7.12	243	Copper, Cu, 29	
15.98	58.09	22.79	30.35	27.06	44.43	20.94	25.48	28	Magnesium, Mg 12	Compressive Yield Strength
15.84	172.33	19.91	128.74	69.87	315.34	23.57	23.78	21	Aluminum, Al 13	
21.02	76.06	31.04	33.60	33.59	647.99	18.64	21.91	23	Manganese, Mn, 25	
29.64	217.95	43.22	149.29	95.91	744.31	28.10	55.17	18	Iron, Fe 26	
18.43	71.63	30.76	30.34	33.26	412.07	15.80	16.59	25	Nickel, Ni 28	
18.53	132.97	29.44	110.01	52.55	169.59	33.74	28.26	27	Copper, Cu, 29	
1.22	5.84	2.95	4.25	2.64	0.01	3.70	1.84	84	Magnesium, Mg 12	Poisson's Ratio
1.04	7.62	1.48	4.90	2.58	0.02	1.95	1.38	103	Aluminum, Al 13	
1.43	9.64	2.85	6.31	5.53	0.02	5.64	2.61	253	Manganese, Mn, 25	
2.32	10.77	4.52	6.97	6.50	0.03	6.26	3.41	296	Iron, Fe 26	
3.56	13.61	4.82	6.06	7.38	0.03	5.43	4.42	127	Nickel, Ni 28	
3.33	11.97	6.27	7.70	5.25	0.02	5.71	5.04	170	Copper, Cu, 29	
39.98	165.64	39.44	84.64	84.15	9.03	43.87	55.13	16	Magnesium, Mg 12	Charpy Impact
55.62	649.49	42.47	486.26	271.24	44.11	27.58	47.99	37	Aluminum, Al 13	
68.30	1298.80	29.81	994.22	529.88	90.55	197.97	122.32	47	Manganese, Mn, 25	
72.40	724.03	121.36	729.09	270.83	82.62	233.02	100.90	61	Iron, Fe 26	
68.94	1737.60	48.21	1335.21	718.91	87.72	270.84	107.59	53	Nickel, Ni 28	
68.86	722.50	38.46	504.72	304.51	57.06	256.79	132.52	47	Copper, Cu, 29	
16.37	265.71	19.64	210.91	122.52	34.27	32.31	27.29	30	Magnesium, Mg 12	Machinability
38.86	134.47	61.03	85.83	67.40	44.67	67.71	44.22	68	Aluminum, Al 13	
19.06	126.72	32.18	94.49	51.13	20.25	28.81	20.86	169	Manganese,	

									Mn, 25	
26.98	119.93	48.72	79.74	55.05	28.46	68.07	34.38	224	Iron, Fe 26	
20.06	139.01	30.31	88.79	67.09	36.61	23.25	24.32	121	Nickel, Ni 28	
43.05	102.44	70.19	94.56	54.97	36.04	162.55	56.42	178	Copper, Cu, 29	
1.35	30.85	1.27	24.44	19.83	5.31	2.05	2.23	84	Magnesium, Mg 12	Shear Modulus
2.38	49.56	2.73	23.37	21.90	13.32	6.78	4.30	102	Aluminum, Al 13	
1.53	143.04	1.93	114.34	72.59	24.97	3.76	1.76	272	Manganese, Mn, 25	
1.82	114.95	1.85	87.94	61.35	22.80	5.21	2.48	317	Iron, Fe 26	
2.42	174.46	1.54	128.69	84.43	25.19	6.89	4.37	130	Nickel, Ni 28	
2.22	82.29	2.09	39.30	43.58	17.11	3.47	2.71	175	Copper, Cu, 29	
26.25	77.55	40.23	38.36	36.58	68.74	31.14	31.34	77	Magnesium, Mg 12	Shear Strength
30.50	83.06	48.24	37.93	40.97	107.99	22.19	34.95	77	Aluminum, Al 13	
25.77	78.20	33.66	37.16	36.73	68.46	31.93	33.50	69	Manganese, Mn, 25	
29.48	91.50	37.69	45.72	46.13	129.92	20.40	41.40	77	Iron, Fe 26	
10.52	35.83	8.16	20.64	20.36	190.50	28.64	20.48	22	Nickel, Ni 28	
23.66	78.52	41.60	39.74	36.02	66.67	29.14	32.06	97	Copper, Cu, 29	
25.95	67.03	44.39	26.67	32.90	3.93E-06	22.03	32.34	95	Magnesium, Mg 12	Electrical Resistivity
52.17	139.95	56.84	56.73	86.34	4.65E-05	35.42	50.95	157	Aluminum, Al 13	
65.49	287.61	66.21	179.27	124.22	3.08E-05	26.21	58.48	308	Manganese, Mn, 25	
65.28	260.00	70.84	161.40	118.99	3.47E-05	29.68	54.87	379	Iron, Fe 26	
74.17	234.10	73.96	178.08	102.34	3.57E-05	23.00	70.93	197	Nickel, Ni 28	
57.06	135.94	70.38	61.91	68.71	2.54E-05	30.33	55.51	228	Copper, Cu, 29	
2.18	47.22	4.07	49.21	15.20	61.91	5.69	3.90	37	Magnesium, Mg 12	Heat Of

1.29	68.17	2.82	60.91	21.50	76.51	3.80	2.15	23	Aluminum, Al 13	Fusion
0.94	5.74	2.41	3.30	2.99	16.29	4.13	2.48	27	Manganese, Mn, 25	
3.21	665.15	2.66	501.22	255.43	143.06	5.33	4.40	23	Iron, Fe 26	
2.26	485.16	4.24	442.34	150.17	107.58	4.56	3.35	27	Nickel, Ni 28	
2.99	497.23	5.39	419.86	147.67	115.87	5.68	3.83	38	Copper, Cu, 29	
3.26	20.31	3.14	12.22	9.86	2.93	4.92	4.15	100	Magnesium, Mg 12	CTE, Linear
9.15	114.09	17.84	176.33	44.02	5.81	9.45	10.30	160	Aluminum, Al 13	
11.60	87.38	22.34	131.11	41.17	5.47	9.95	9.18	240	Manganese, Mn, 25	
13.67	88.38	29.99	116.66	40.49	5.62	55.22	13.42	335	Iron, Fe 26	
15.87	112.27	35.86	150.87	43.25	5.58	8.31	7.16	186	Nickel, Ni 28	
4.90	34.95	7.02	16.71	18.33	4.31	8.32	6.18	250	Copper, Cu, 29	Specific Heat Capacity
2.15	45.71	4.17	34.06	16.48	0.17	2.28	2.36	95	Magnesium, Mg 12	
3.08	70.62	2.47	52.23	55.67	0.26	5.91	5.19	146	Aluminum, Al 13	
2.24	35.32	3.18	20.05	16.12	0.21	3.07	2.38	304	Manganese, Mn, 25	
3.18	48.66	4.49	32.60	19.24	0.18	11.51	4.03	375	Iron, Fe 26	
4.05	54.59	6.21	36.11	21.53	0.21	15.21	5.56	196	Nickel, Ni 28	Heat Conductivity
2.15	46.46	2.68	33.65	30.54	0.27	2.35	2.45	215	Copper, Cu, 29	
20.07	90.23	21.04	57.33	41.20	52.88	21.21	21.76	98	Magnesium, Mg 12	
22.26	480.16	25.81	335.42	190.78	68.54	27.55	25.06	152	Aluminum, Al 13	
16.67	164.05	17.35	89.80	68.42	57.44	28.52	20.12	300	Manganese, Mn, 25	
20.27	175.64	20.32	101.27	78.32	61.04	36.44	24.60	392	Iron, Fe 26	Heat Conductivity
25.55	170.76	27.14	97.75	92.66	48.51	37.22	34.27	197	Nickel, Ni 28	
23.63	279.19	21.82	200.23	115.22	93.63	31.13	25.10	247	Copper, Cu, 29	

## מסקנות ודיון

כפי שניתן לראות בתוצאות, יש הבדלים גדולים מאוד בביצועים בין תכונה לתכונה ובין יסודות שונים בתוך התכונה. ניתן לראות בבירור שברוב ההרצות (97.5%, 117 מתוך 120) הרשתות פעלו יותר טוב מאשר ההשוואה לחציון (בהשוואת טעות ממוצעת). בשלוש ההרצות האחרות ניתן לראות שטעות הרשת בקצוות יותר נמוכה – לעתים במידה ניכרת, כמו בדוגמא של Shear Strength וניקל (Ni 28).

כמו כן, ניתן לראות שהטעות הממוצעת בחמשת הרשתות הטובות ביותר לרוב נמוכה (85.84% 103 מתוך 120) מהטעות הממוצעת של הרשת הטובה ביותר. מעיון בתוצאות האלה, הגענו למסקנה שהצורה המדויקת ביותר לחישוב תכונות לפי הרכב תהיה לפי ממוצע של חמש רשתות. על מנת ולשפר את הדיוק, נציע אף הרחבה. הדרך הטובה ביותר לחישוב תכונות סגסוגת מהרכב צריכה להיות שימוש בממוצע חמש הרשתות הטובות לפי כל מתכת שמופיעה בסגסוגת – במילים אחרות, בתרכובת של 25% ניקל ו75% נחושת נשתמש בעשר רשתות – חמש הטובות של ניקל וחמש הטובות של נחושת, ונעשה ממוצע שלהן.

## סיבות אפשריות לשגיאה

- כפי שניתן לראות, לא הצלחנו לאשש תכונות מסוימות. יכולות להיות מספר סיבות לשגיאה הזו:
1. **מאגר נתונים מוגבל** – מאגר הנתונים שלנו כולל נתונים חלקיים בלבד. מכיוון שהוא נאסף באופן חצי אקראי (מה שנפוץ בתעשייה נכנס אליו) הוא משמיט פרטים מסוימים וחוזר על אחרים. מסיבה זו, חלק מרשתות הנורונים לא מוצאות קשר בין תכונות והרכב.
  2. **נכונות המאגר** – המאגרים באתר matweb.com לא בהכרח עדכניים ונכונים; ישנו ניסיון לדאוג לעדכונם, אבל אין שום דרך לדעת עד כמה המאגר באמת נכון.
  3. **נעשתה אופטימיזציה מינימאלית** – עקב הכמות הגדולה של התכונות והאפשרויות הרבות לפלח את הנתונים ( $10^{20}$ ), השתמשנו במבנה מוח אחיד לכל התכונות ולכל המתכות.
  4. **חסרים נתונים** – דרך עיבוד המתכת, הקובעת את תכונותיה, אינה מופיעה כחלק מהנתונים על המתכת, מה שמביא בהכרח לסטייה מסוימת בתוצאות.

## רעיונות נוספים להרחבה

1. **להשתמש במאגר נתונים גדול ומדויק יותר.** המאגר שהשתמשנו בו לא היה אידיאלי ממספר בחינות, וחסרונותיו השפיעו על יעילות המודל שלנו שמטבעו מסתמך על מאגרי נתונים. לפי כן, אם ברצוננו לבנות מודל טוב יותר, נצטרך מאגר שלם ומגוון יותר.
2. **חקירה מעמיקה של כל תכונה.** כל תכונה ותכונה מושפעת מגורמים שונים ועל כן אין אנו יכולים לצפות מאותה רשת שמוגבלת למימדים קבועים שתצליח לפעול על כולן. לכן היה

עלינו לבחור מימדים שונים של רשתות לכל תכונה על מנת לקבל תוצאות מספקות. עקב הכמות הגדולה של תכונות ויסודות, לא הייתה לנו האפשרות לבצע אופטימיזציה זו ברמה היסודית ביותר. מה שגם לא היה באפשרותנו להתייחס בעומק לכל הידע המדעי שנמצא לכל תכונה ותכונה. מכאן שנאלצנו לבנות מודל חישובי כללי. אם ברצוננו לשפר את המודל, נאלץ להעמיק את החקירה על כל תכונה בנפרד.

3. **פילוח לפי משפחות סגסוגות לכל תכונה.** כפי שהוסבר על החשיבות של חקירת כל תכונה בנפרד, כן הדבר תקף גם למשפחות של סגסוגות. את הסגסוגות ניתן לחלק למשפחות לפי מרכיבם העיקרי, וזאת מכיוון שלמשפחות אלו יש חוקים מוגדרים לתכונותיהם. במודל שלנו לא יכולנו לבדוק את כל הידע המדעי שנמצא על כל משפחה ומשפחה. לכן אם ברצוננו לשפר את המודל, נאלץ להעמיק את החקירה על משפחת סגסוגות בנפרד.

## סיכום

בעבודה זו ניסינו לראות האם אפשר ליצור מודל חישובי שיצליח לגלות קשרים בין תכונות הסגסוגת למרכיביה. המודל החישובי בנוי מרשת נוירונים מלאכותית אשר מסוגלת "ללמוד" מניסיון. זאת בתקווה שהרשת תצליח ללמוד את הקשרים בין התכונות והמרכיבים של הסגסוגות. למרבה שמחתנו, כאשר ניסינו לבנות רשת שתחזה תכונות לפי מרכיבים - קיבלנו אחוזי טעות נמוכים, ועוד בעזרת רשתות במימדים קטנים יחסית. למרות שמעצם טבעו המצומצם של המאגר, לעתים ניתן לבצע ניבוי טוב בעזרת ערך ממוצע, הצלחנו במסגרת פעולות אישוש להראות שלרשתות יש יתרון ברוב המקרים, ובמיוחד כשמדובר בחישוב ערכים שאינם קרובים לממוצע. למרות שהצלחת המודל לא אחידה לכל התכונות והיסודות, גילינו פוטנציאל גדול מאוד בנושא, ואנו בטוחים שבפרויקט שלנו גילינו רק את קצה הקרחון של מה שניתן להשיג. על מנת ולברר את כוחה האמיתי של השיטה, דרושה חקירה נרחבת של כל תכונה וכל יסוד, יחד עם אופטימיזציה ומאגר נתונים מדויק וגדול. דבר נוסף שניתן להסיק מן התוצאות והמימדים הקטנים של הרשתות שלנו הוא שאולי קיימים קשרים פשוטים יחסית בין הרכב הסגסוגת לרוב תכונותיה, שאפשר לפתח להם ביטוי אנליטי דרך חקירה של הרשתות. בתכונת הצפיפות כבר ידוע קשר כזה, מה שמסביר את העובדה שזאת התכונה בעלת אחוזי ההצלחה הגבוהים ביותר. כמו כן, אנו מקווים שתוכנת התוצאה שלנו תתגלה כשימושית ויעילה לכל העוסקים בדבר. מקווים שהפרויקט שלנו היה מעניין.

### ביבליוגרפיה

1. **NADCA**. Predicting compositions and properties of aluminum die casting alloys using artificial neural network. *Metallurgical Science and Technology*, 2008, כרך 26, עמ' 1.
2. **W. Sha S. Malinov**. Application of artificial neural networks for modelling correlations in titanium alloys. *Materials Science and Engineering*, 2004, כרך A365, עמ' 211–202.
3. *Wikipedia, the free encyclopedia*. [מקור] [צוטט: 22 6 2011]. <http://en.wikipedia.org>.

## רשימת איורים

.....2	איור I - מבנה המוח
.....2	איור II - חצאי המוח
.....3	איור III - תמונת מיקרוסקופ של רשתות נוירונים במוח
.....3	איור IV - נוירון
.....4	איור V - למידה ברשת נוירונים
.....5	איור VI - פעולת חישוב מתבצעת בנוירון
.....6	איור VII - ארכיטקטורת רשת נוירונים
.....6	איור VIII - קשרים סינפטיים בין נוירונים
.....7	איור IX - שימוש במטריצות להדמיית פעולת הרשת
.....8	איור X - משטח למידה
.....13	טבלה I - פרמטרי הרצה
.....18	טבלה II -השוואת תוצאות הערכת מודול יאנג בארבעה יסודות (לכל יסוד מוח אחר)



רשימת תכונות והמספר הסידורי שלהן במאגר

מספר סידורי	תכונה	מספר מופעים	יחידות
1	Density	993	$\frac{gr}{cm^3}$
5	Tensile Strength, Ultimate	875	
7	Elongation at Break	870	%
6	Tensile Strength, Yield	838	MPa
8	Modulus of Elasticity	741	GPa
20	Thermal Conductivity	737	$\frac{W}{m^2C}$
16	Electrical Resistivity	711	Ohm-cm
19	Specific Heat Capacity	700	$\frac{J}{gr^{\circ}C}$
18	CTE linear	637	$\frac{\mu m}{m^{\circ}C}$
14	Shear Modulus	580	GPa
2	Hardness, Brinell	561	-
10	Poisson's Ratio	546	-
21	Melting Point	523	$^{\circ}C$
23	Liquidus	483	$^{\circ}C$
13	Machinability	462	%
22	Solidus	430	$^{\circ}C$
4	Hardness, Vickers	405	-
3	Hardness, Knoop	387	-
28	Hardness, Rockwell B	387	-
29	Hardness, Rockwell C	246	-
65	Bulk Modulus	238	GPa
31	Annealing Temperature	192	$^{\circ}C$
15	Shear Strength	172	MPa
46	Reduction of Area	161	%
24	Fatigue Strength	158	MPa
11	Charpy Impact	130	J
17	Heat of Fusion	93	$^{\circ}C$
45	Magnetic Permeability	84	$\frac{H}{m}$
9	Compressive Yield Strength	74	MPa
26	Casting Temperature	73	$^{\circ}C$
51	Izod Impact	73	J
34	Compressive Strength	58	MPa
27	Hardness, Rockwell A	50	-
30	Solution Temperature	49	$^{\circ}C$
67	Maximum Service Temperature, Air	46	$^{\circ}C$

°C	40	Aging Temperature	36
-	40	Hardness Rockwell F	40
MPa	35	Ultimate Bearing Strength	37
MPa	35	Bearing Yield Strength	38
°C	32	Recrystallization Temperature	55
MPa	29	Tensile Strength at Break	43
	25	Fracture Toughness	48
°C	24	Processing Temperature	57
-	23	Hardness, Rockwell E	69
MPa	22	Creep Strength	41
GPa	18	Compressive Modulus	35
°C	17	Melt Temperature	25
-	15	Hardness, HR30T	42
°C	14	Curie Temperature	68
	13	Emissivity(0-1)	32
-	12	Reflection Coefficient, Visible(0-1)	33
$\frac{M}{H}$	11	Magnetic Susceptibility	49
MPa	10	Rupture Strength	44
GPa	7	Tensile Modulus	63
	5	Grain Size	60
$\frac{m}{s}$	4	Velocity of Sound	59
	3	Bend Radius Minimum	66
	2	Softening Point	54
°C	2	Boiling Point	56
	2	RMWA Class	58
	2	Proportional Limit	64
-	1	Hardness, Rockwell 15T	39
	1	Elastic Limit	47
°C	1	Precipitation Temperature	50
-	1	Coefficient of Friction, Dynamic	52
-	1	Coefficient of Friction, Static	53
-	1	Hall Coefficient	61
J	1	Impact Test	62
J	0	Charpy Impact, Unnotched	12

## פורמט שמות קובץ בהם התוכנה משתמשת:

*APF\_[Main Element]\_[Property Number]\_[Modifier].mat*

### Alloy Property Finder – APF

לפורמט זה יש שני סוגי קבצים: קובץ "הרשתות הטובות ביותר" (בתיקה Best Brains) שנוצר על ידי קובץ statistics, וקובץ מידע גולמי הנמצא בתיקה output ונוצר על ידי generate\_networks. קובץ המידע הגולמי מכיל מצב שמירה (save state) של Matlab בזמן סוף ההרצה. קובץ הרשתות הטובות שומר את X הרשתות הטובות ביותר לתכונה וליסוד מסוימים. לדוגמא, הקובץ Best Brains/APF\_12\_1\_5.mat מכיל את חמשת הרשתות הטובות ביותר היכולות לחשב את תכונת מספר 1 של סגסוגות המורכבות מאלמנט מספר 12 (בתור אלמנט ראשי או משני). במילים אחרות, חמשת הרשתות הטובות ביותר לחישוב צפיפות של סגסוגות המכילות מגנזיום. הקובץ output/APF\_12\_1\_1000 לעומת זאת יכול את המצב שבו generate\_networks סיימה לעבוד ומאפשר לעבד את הנתונים בstatistics. קובץ זה מדבר על חישוב הצפיפות של סגסוגות המכילות מגנזיום תוך כדי ייצור 1000 ניסויים (1000 רשתות שונות)