

WNISKOWANIE ROZMYTE DO OKREŚLENIA WŁASNOŚCI POWŁOK FOSFORANOWO-WAPNIOWYCH NANIESIONYCH METODĄ IBAD NA PODGRZANE PODŁOŻA

SYLWIA SOBIESZCZYK

WYDZIAŁ MECHANICZNY, POLITECHNIKA GDAŃSKA,
80-952 GDAŃSK, NARUTOWICZA 11/12,
SSOBIESZ@PG.GDA.PL

Streszczenie

Praca przedstawia rozmyty system wnioskowania dla zamodelowania związków pomiędzy temperaturą podłoża oraz stosunkiem molowym Ca/P w gradientowej powłoce hydroksyapatytowej na podłożu tytanowym. Przeprowadzono symulację działania sterownika rozmytego za pomocą oprogramowania Matlab.

[Inżynieria Biomateriałów, 62, (2007), 8-11]

Wprowadzenie

Hydroksyapatytowe (HA) powłoki naniesione na podłoża metalowe, oferujące dobrą osseointegrację, są używane jako bioaktywne powłoki na implantach medycznych. Powłoki HA bezpośrednio łączą się z kością i wspomagają tworzenie się nowej tkanki dookoła implantu ze względu na swoje podobieństwo składu chemicznego i struktury krystalicznej do apatytu ludzkiego występującego w szkieletie kostnym [1].

Krystaliczność powłoki hydroksyapatytowej (HA), zależna od metody nanoszenia oraz obróbki termicznej, określa stopień rozpuszczalności powłoki. Amorficzny HA z łatwością rozpuszcza się w środowisku ludzkiego ciała (promując wzrost komórek), natomiast krystaliczny HA rozpuszcza się wolniej, umożliwiając tworzenie się nowej tkanki kostnej. Ważne jest kontrolowanie stopnia krystaliczności, który powinien odpowiadać szybkości wzrostu kości wokół implantu, zabezpieczając implant przed obluźwaniem. Stosunek molowy Ca/P zbliżony do wartości 1,67 jest najbardziej korzystny dla wzrostu kości [1]. Rozważona została metoda nanoszenia powłoki w obecności wiązki jonów (IBAD), ponieważ umożliwia ona zmiany mikrostruktury oraz krystaliczności powłoki poprzez kontrolowanie temperatury podgrzania podłoża podczas nanoszenia powłoki [2,3]. W celu przeanalizowania związków pomiędzy temperaturą podłoża a krystalicznością powłoki HA można wykorzystać podejście bazujące na wnioskowaniu rozmytym.

Metodyka badań

Rozmyty system wnioskowania umożliwia radzenie sobie z problemami, które są niejednoznaczne i przybliżone poprzez odwzorowanie wejścia w wyjście w nieliniowy sposób, bez użycia modeli matematycznych [4]. Podejście wykorzystujące logikę rozmytą może być rozważane jako system bazujący na wiedzy, który wprowadza wiedzę (dane z badań eksperymentalnych oraz doświadczenie badaczy) do bazy reguł w postaci zbiorów rozmytych oraz bazę danych jako rozmyte funkcje przynależności (baza wiedzy) (RYS. 1). Moduł rozmywania przekształca dokładne dane wejściowe w zbiory rozmyte na określonej przestrzeni rozważań. Następnie przeprowadzany jest proces wnioskowania rozmytego,

FUZZY REASONING APPROACH TO PROPERTIES' DETERMINATION OF CALCIUM PHOSPHATE COATINGS PROCESSED USING ION BEAM ASSISTED DEPOSITION ON HEATED SUBSTRATES

SYLWIA SOBIESZCZYK

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING, GDAŃSK UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, 80-952 GDAŃSK, NARUTOWICZA 11/12,
SSOBIESZ@PG.GDA.PL

Abstract

A fuzzy reasoning approach has been demonstrated for modelling the relationship between substrate temperature and Ca/P ratio of the functionally graded HA coating on titanium substrate. A fuzzy logic controller (FLC) was utilized using Matlab Software.

[Engineering of Biomaterials, 62, (2007), 8-11]

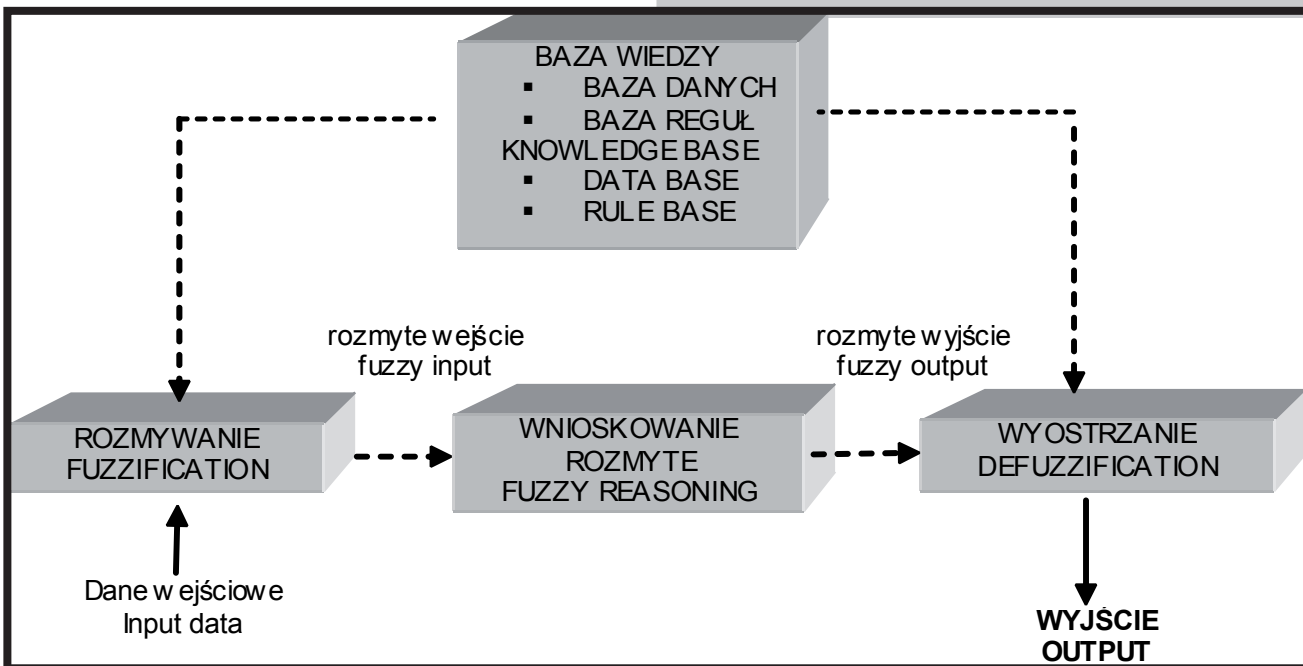
Introduction

Hydroxyapatite (HA) coatings deposited on metallic substrates, offering a very good osteoconductivity, have been used as bioactive coatings on biologically inert medical implants. HA coatings directly bond to the bone and enhance the new bone formation around the implant due to their chemical composition and crystal structure similarity to apatite in the human skeletal system [1].

Hydroxyapatite (HA) coating crystallinity, dependent on the processing method and heat treatment, determines the dissolution rate of the coating. Amorphous HA is more easily dissolved in the body environment (promoting the cell growth) and crystalline HA dissolves slower, therefore allowing more time for new bone formation. It is important to control the degree of crystallinity that should match the rate of bone growth around the implant, preventing the latter implant loosening. The molar ratio Ca/P close to 1.67 is beneficial for the bone in-growth as it remains the calcium to phosphate ratio to natural bone [1]. The Ion Beam Assisted Deposition method (IBAD) has been taken into the account as the method which enables to control the microstructure and the crystallinity of the coating by controlled substrate heating during the deposition [2,3]. In order to investigate the relations between the substrate heating and crystallinity of the deposited HA coating, fuzzy reasoning approach can be utilized.

Material and methods

Fuzzy reasoning approach provides an efficient way to handle problems involving ambiguity and vagueness by mapping an input to an output in a nonlinear way, without mathematical models [4]. Fuzzy logic system can be viewed as a knowledge-based system which incorporates knowledge (data from experimental results and researcher's experience) into the rule base as fuzzy rules, and data base as fuzzy membership functions (knowledge base) (FIG.1). The fuzzification unit converts crisp inputs to fuzzy sets over the domains of discourse. The fuzzy reasoning process is conducted by inference unit which uses the fuzzy rules in



RYS. 1. Struktura rozmytego systemu wnioskowania.
FIG. 1. The structure of fuzzy reasoning system.

który używa reguł rozmytych zawartych w bazie wiedzy w celu określenia rozmytych wniosków, również w postaci zbiorów rozmytych. Jako wynik procesu wnioskowania rozmytego, moduł wyostrzania przekształca wynikiowy zbiór rozmyty w precyzyjne rozwiązanie liczbowe.

Dziedziny zbiorów wejściowych ustalono w oparciu o dane literaturowe, które zostały przedstawione w TABELI 1, gdzie zaprezentowano zakresy zmiennych dla temperatury podłoża i odległości od podłoża (w powłoce) [2]. Zakres zmienności dla temperatury podłoża wynosi $(450^{\circ}\text{C}\div 750^{\circ}\text{C})$ natomiast odległość od podłoża $(0\div 1000\text{ nm})$, na podstawie badań przeprowadzonych przez Blalock'a i in. [2]. Wyjściowe zbiory rozmyte reprezentują rozkład zależności molowej Ca/P przez przekrój powłoki $(0\div 28)$. Dla każdej zmiennej wejściowej i wyjściowej rozmytej określono zbiory rozmyte nadając im nazwy lingwistyczne: „bardzo mały (VS), mały (S), średni (M), duży (L), bardzo duży (VL)”. Wygenerowano funkcje przynależności dla zbiorów rozmytych, wykorzystując trójkątną i trapezoidalną postać

Odległość od podłoża Ti Distance from Ti substrate [nm]	Stosunek molowy Ca/P Atomic Ca/P ratio			
	Temperatura podłoża Substrate temperature [°C]			
	450	550	650	750
0	0	0	0	0
200	1.9	2.4	2.4	0
400	1.95	2.7	2.3	16
600	2	2.9	2	16
800	2.2	2.5	4.6	14
1000	-	-	4.1	26.3

TABELA 1. Wyniki eksperymentalne opracowane za pomocą STEM-EDS – średni stosunek molowy Ca/P dla zbioru określonych wartości temperatur podłoża przez przekrój powłoki [2].

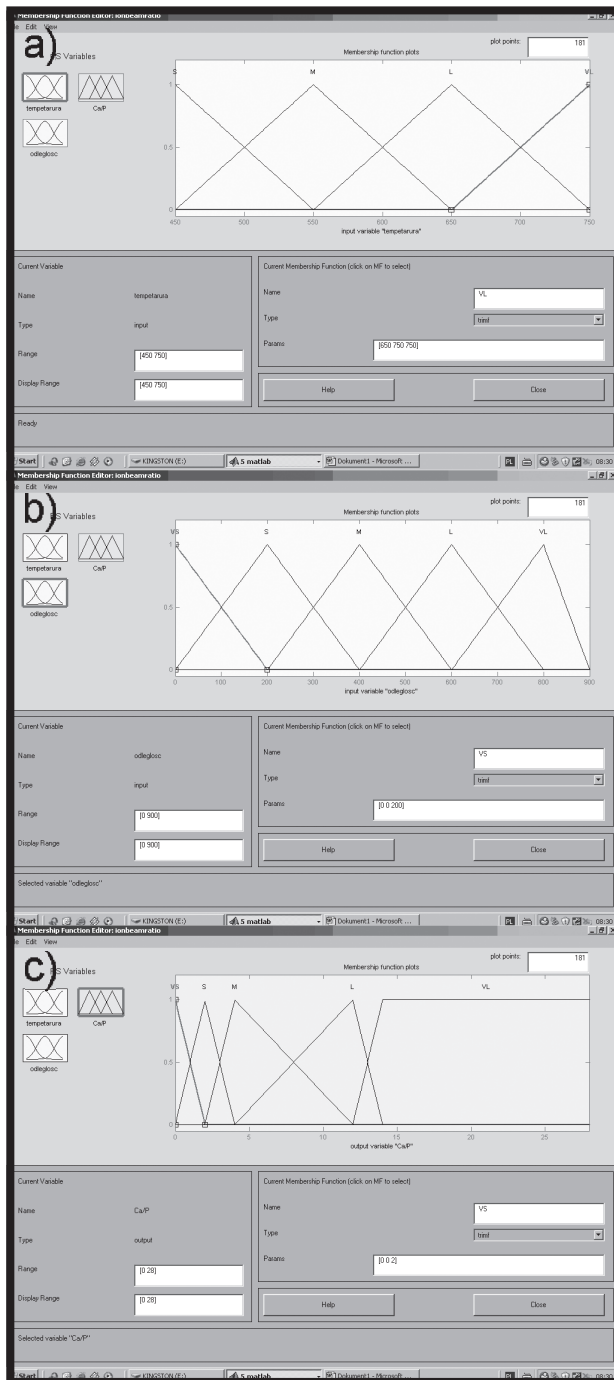
TABLE 1. Experimental results evaluated by STEM-EDS – the average atomic Ca/P ratio for sets substrate temperatures along the HA coatings thickness [2].

the knowledge base to produce fuzzy conclusions, also in form of fuzzy sets. As a result of a reasoning process, the defuzzification unit converts resultant fuzzy set into precise numerical solution.

Domains of input sets have been established based on literature data shown in TABLE 1, where variability ranges for substrate temperatures and distance from Ti substrate were observed. Variability range for substrate temperature is $(450^{\circ}\text{C}\div 750^{\circ}\text{C})$, and distance from the substrate $(0\div 1000\text{ nm})$, based on research conducted by Blalock et al. [2]. Fuzzy output sets represent the Ca/P ratio distribution over the thickness of the coating $(0\div 28)$. For each fuzzy input and output variable corresponding fuzzy sets were established with given linguistic names: “very small (VS), small (S), medium (M), large (L), very large (VL)”. Membership functions for fuzzy sets were generated using triangular and trapezoidal membership function form (FIG. 2) [4]. The rule base for fuzzy reasoning system consists of 20 rules in form of ‘if-then’ statements presented in TABLE 2. For example, the rule 1 can be interpreted as follows: “If substrate temperature is very small (S) and distance from Ti substrate is very small (VS), then atomic ratio Ca/P is very small (VS)”. For resultant output value Ca/P ratio, the center of gravity defuzzification method has been used [4]. Fuzzy variables and rule base have been introduced into Fuzzy Logic Toolbox in Matlab environment [5].

Results and discussion

FIG. 3 shows the resulting value of the Ca/P ratio 1.71 for a chosen input variables: substrate temperature 663°C and distance from the substrate 102 nm. The atomic Ca/P ratio distribution is increased with the increasing the substrate temperature over the thickness of deposited samples used in the investigation (TABLE 1). Using designed FLC it is possible to predict Ca/P ratio from the control surface (FIG. 4) for every combination of input parameters with an average error of 3% comparing to the results achieved by microstructure characterization techniques, like transmission TEM and scanning SEM electron microscopies [2,6].



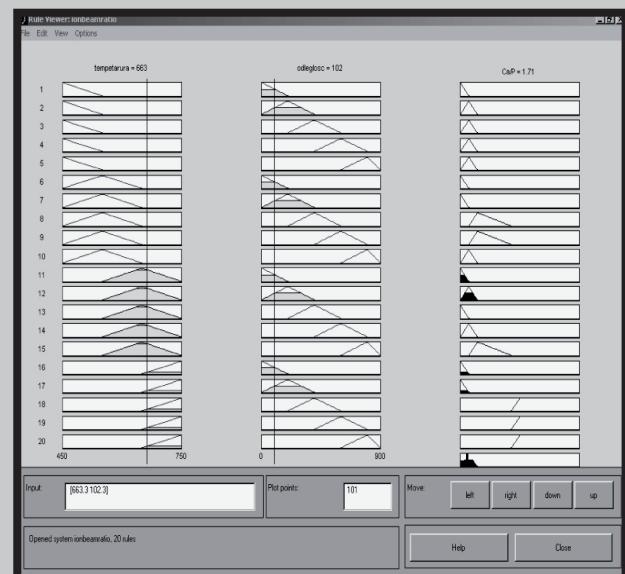
RYS. 2. Zakresy dla zmiennych wejściowych i wyjściowej: a) temperatura podłoża [°C], b) odległość od podłoża Ti przez przekrój powłoki [nm], c) stosunek molowy Ca/P.

Fig. 2. Input and output variable ranges: a) substrate temperature [°C], b) distance from Ti substrate [nm], c) atomic Ca/P ratio.

funkcji przynależności (RYS. 2) [4]. Baza reguł zawiera 20 reguł w postaci zdań warunkowych „jeżeli-to” przedstawionych w TABELI 2. Np. reguła 1 może być interpretowana w następujący sposób: „Jeżeli temperatura podłoża jest mała (S) i odległość od podłoża Ti jest bardzo mała (VS), to stosunek molowy Ca/P jest bardzo mały (VS)”. Dla określenia wynikowej wartości stosunku molowego Ca/P wykorzystano metodę wyostrzenia środka ciężkości [4]. Rozmyte zmienne oraz bazę reguł wprowadzono do środowiska Matlaba, Fuzzy Logic Toolbox [5].

Nr reguły	Temperatura podłoża	Odległość od podłoża Ti	Stosunek molowy Ca/P
Rule no	Substrate temperature [°C]	Distance from Ti substrate [nm]	Atomic Ca/P ratio
1	S	VS	VS
2	S	S	S
3	S	M	S
4	S	L	S
5	S	VL	S
6	M	VS	VS
7	M	S	VS
8	M	M	M
9	M	L	M
10	M	VL	M
11	L	VS	VS
12	L	S	S
13	L	M	VS
14	L	L	S
15	L	VL	M
16	VL	VS	VS
17	VL	S	VS
18	VL	M	VL
19	VL	L	L
20	VL	VL	VL

TABELA 2. Reguły rozmyte.
TABLE 2. Fuzzy rules.



RYS. 3. Wynikowa wartość stosunku molowego Ca/P 1.71 dla wejść: temperatura podłoża 663°C oraz odległość od powierzchni podłoża Ti 102 nm.

FIG. 3. Resultant Ca/P ratio 1.71 for inputs: substrates temperature 663°C and distance from the Ti substrate 102 nm.

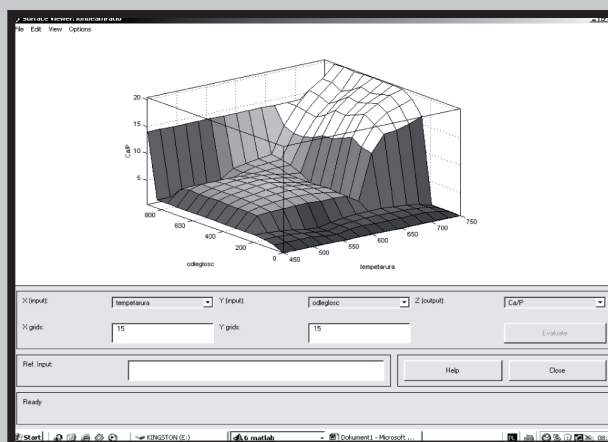
Wyniki badań i dyskusja

Na RYS. 3 pokazano wynikową wartość stosunku molowego Ca/P dla wybranych wartości wejściowych: temperatury podłoża 663°C oraz odległości do powierzchni podłoża 102 nm. Stosunek molowy Ca/P rośnie wraz ze wzrostem temperatury podłoża w przekroju powłoki, która jest rozważana w niniejszym opracowaniu (TABELA 1). Przy użyciu wnioskowania rozmytego możliwe jest przewidzenie stosunku molowego Ca/P na podstawie powierzchni sterowania (RYS. 4) dla każdej kombinacji parametrów wejściowych ze średnim błędem 3% w porównaniu do wyników otrzymanych za pomocą metod określania charakterystyki mikrostruktury, przy użyciu np. mikroskopu elektronowego transmisyjnego (TEM) lub skaningowego (SEM) [2,6].

Wnioski

Otrzymane wyniki przeprowadzonej symulacji potwierdzają, że zaproponowana metoda oparta o wnioskowanie rozmyte (FLC) jest w stanie poprawnie przewidzieć stosunek molowy Ca/P, w porównaniu z wynikami eksperymentalnymi przedstawionymi w literaturze [2].

Pokazano, że za pomocą tej techniki, która wykorzystuje zasadę wnioskowania rozmytego do określenia stosunku molowego Ca/P podczas nanoszenia powłoki hydroksyapatytowej metodą IBAD, można przeprowadzić skuteczną analizę krystaliczności powłoki w zależności od temperatury podłoża i odległości od podłoża Ti.



RYS. 4. Powierzchnia sterowania dla stosunku molowego Ca/P na podstawie bazy reguł.
FIG. 4. Control surface for ratio Ca/P based on the rule base.

Conclusions

The obtained simulation results confirm that the design using FLC can predict properly the ratio of Ca/P, compared to the experimental results taken from the literature [2].

It has been shown that this technique, which employs FLC to estimate Ca/P ratio during IBAD HA deposition, is an efficient way to attain robustness analysis of the coating crystallinity depending on substrate temperature and the distance from the Ti substrate along the coating's thickness.

Piśmiennictwo

- [1] Garcia C., Cere S., Duran A.: Bioactive coatings deposited on titanium alloys. *Journal of Non-Crystalline Solids* 352 (2006) 3488-3495.
- [2] Blalock T., Xiao B., Rabiei A.: A study on microstructure and properties of calcium phosphate coatings processed using ion beam assisted deposition on heated substrates. *Surface & Coating Technology* 201 (2007) 5850-5858.
- [3] Hamdi M., Ektessabi A-I.: Calcium phosphate coatings: A comparative study between simultaneous vapor deposition and electron beam deposition techniques. *Surface & Coatings Technology* 201 (2006) 3123-3128.

References

- [4] Łachwa A.: Rozmyty świat zbiorów, liczb, relacji, faktów, reguł i decyzji. *Problemy współczesnej nauki, teoria i zastosowania*. Akademicka Oficyna Wyd. EXIT, Warszawa, 2001.
- [5] Jang R., Gulley N.: *Fuzzy Logic Toolbox User's Guide*. The MathWorks, Inc. 1995.
- [6] Rabiei A., Thomas B., Neville B., Lee J.W., Cuomo J.: A novel technique for processing functionally graded HA coatings. *Materials Science and Engineering C* 27 (2007) 523-528.