

УДК: 519.688:004.942

Моделирование свойств конструкционного композитного материала, армированного углеродными нанотрубками, с использованием перцептронных комплексов

С. П. Дударов, А. Н. Диев, Н. А. Федосова, Э. М. Кольцова^а

РХТУ им. Д. И. Менделеева,
Россия, 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 9

E-mail: ^а kolts@muctr.ru

*Получено 07 октября 2014 г.,
после доработки 03 февраля 2015 г.*

Использование алгоритмов, основанных на нейронных сетях, может оказаться неэффективным при малых объемах экспериментальных данных. Авторы статьи рассматривают решение данной проблемы на примере моделирования свойств керамического композита, армированного углеродными нанотрубками, с помощью перцептронного комплекса. Такой подход позволил получить математическое описание объекта исследования при минимальном объеме и неполноте исходной информации, полученной в ходе экспериментов (объем необходимой экспериментальной выборки уменьшился в 2–3.3 раза). В статье рассмотрены различные варианты структур перцептронных комплексов. Выявлено, что наиболее подходящей структурой обладает перцептронный комплекс с проскоком двух входных переменных. Относительная ошибка составила всего 6%. Выбранный перцептронный комплекс показал свою эффективность для предсказания свойств керамического композита. Относительные ошибки по выходным компонентам составили 0.3%, 4.2%, 0.4%, 2.9% и 11.8%.

Ключевые слова: нейронная сеть, перцептронный комплекс, математическая модель, моделирование, керамический композит, углеродные нанотрубки, прочность на изгиб

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 14-19-00522.

Simulation of properties of composite materials reinforced by carbon nanotubes using perceptron complexes

S. P. Dudarov, A. N. Diev, N. A. Fedosova, E. M. Koltsova

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, 9, Miusskaya square, Moscow, 125047, Russia

Abstract. — Use of algorithms based on neural networks can be inefficient for small amounts of experimental data. Authors consider a solution of this problem in the context of modelling of properties of ceramic composite materials reinforced with carbon nanotubes using perceptron complex. This approach allowed us to obtain a mathematical description of the object of study with a minimal amount of input data (the amount of necessary experimental samples decreased 2–3.3 times). Authors considered different versions of perceptron complex structures. They found that the most appropriate structure has perceptron complex with breakthrough of two input variables. The relative error was only 6%. The selected perceptron complex was shown to be effective for predicting the properties of ceramic composites. The relative errors for output components were 0.3%, 4.2%, 0.4%, 2.9%, and 11.8%.

Keywords: neural network, perceptron complex, mathematical model, simulation, ceramic composite, carbon nanotubes, flexural strength

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 2, pp. 253–262 (Russian).

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 14-19-00522.

Введение

Искусственные нейронные сети — это эффективное средство решения задач моделирования и прогнозирования. Они позволяют получить математическую модель в условиях неполноты и неопределенности исходной информации, основываясь исключительно на экспериментальных данных об изучаемом процессе. Чем больше объем данных, которым обладает исследователь, тем более сложную и точную модель можно получить. Однако довольно часто возникает проблема недостаточности или неполноты исходной экспериментальной информации. В этих случаях общепринятые схемы не эффективны и необходимо искать особые способы получения нейросетевой модели. Одним из таких способов является использование перцептронных комплексов.

Постановка задачи

Получение математического описания с использованием искусственных нейронных сетей требует проведения объемных экспериментальных исследований. Чем большее количество факторов влияет на выходные переменные модели, тем больший объем исследований необходимо провести. Кроме того, при множестве влияющих факторов использование структуры нейронной сети в виде однослойного перцептрона недостаточно эффективно и для достижения ее высокой моделирующей способности следует вводить в сеть один или два дополнительных скрытых слоя нейронов, что требует еще большего объема исследований. Во многих случаях проведение экспериментов сопряжено с большими временными и экономическими затратами. Этот факт заставляет задуматься о нахождении способов получения математического описания изучаемых процессов на основе небольшого количества информации. Перцептронные комплексы могут рассматриваться в качестве потенциально эффективного инструмента получения математического описания в ситуациях, когда проведение большого объема экспериментальных исследований по каким-либо причинам не представляется возможным.

Данная работа использует перцептронные комплексы для моделирования физических свойств композитного керамического материала, основу которого составляет матрица оксида алюминия, армированная углеродными нанотрубками. Композитные керамические материалы могут широко использоваться в автомобилестроении, авиакосмической промышленности, железнодорожном и других видах транспорта в качестве конструкционных и защитных изделий (части газовых турбин, фрикционные материалы, теплозащитные компоненты и т. д.). Физические свойства получаемого продукта зависят от состава исходного сырья и технологии приготовления. Процесс получения композита включает следующие этапы:

- получение гомогенной суспензии углеродных нанотрубок;
- получение шихты оксида алюминия с различным содержанием нанотрубок (0–24 % об.);
- полусухое прессование с помощью гидравлического пресса и пресс-форм цилиндрической и прямоугольной формы;
- компактирование материала вакуумным обжигом при различных температурных режимах.

Для создания перцептронного комплекса выбраны шесть входных характеристик: доля углеродных нанотрубок, максимальная мощность нагрева, время нагрева, суммарное время промежуточных выдержек, количество промежуточных выдержек, интервал повышения температуры; и пять выходных характеристик: водопоглощение, линейная усадка, открытая пористость, плотность, прочность на изгиб. Целевой характеристикой моделирования является величина прочности керамического композита на изгиб.

Общие принципы работы перцептронных комплексов

Модели, основанные на перцептронных комплексах, базируются на принципе разбиения многофакторной модели на ряд более простых подмоделей, которые затем объединяют в обобщающую модель по аналогии с методом группового учета аргументов [Ивахненко, 1982]. Элементарной структурной единицей любой нейронной сети, в том числе однослойного перцептрона, служит искусственный нейрон, имеющий в общем случае несколько входных значений и единственное выходное. Выход нейрона формируется в результате применения активационной функции к взвешенной сумме его входных значений. Модель объекта может иметь множество входных и выходных переменных. В перцептронном комплексе входные переменные модели группируются по две или три и подаются на входы однослойных перцептронов первого уровня. Выходы перцептронов первого уровня подаются на входы результирующего перцептрона. В отдельных случаях часть входов и (или) выходов модели может соединяться только с одной из сетей комплекса («проскок» входа или выхода). Общая структура перцептронного комплекса представлена на рисунке 1.

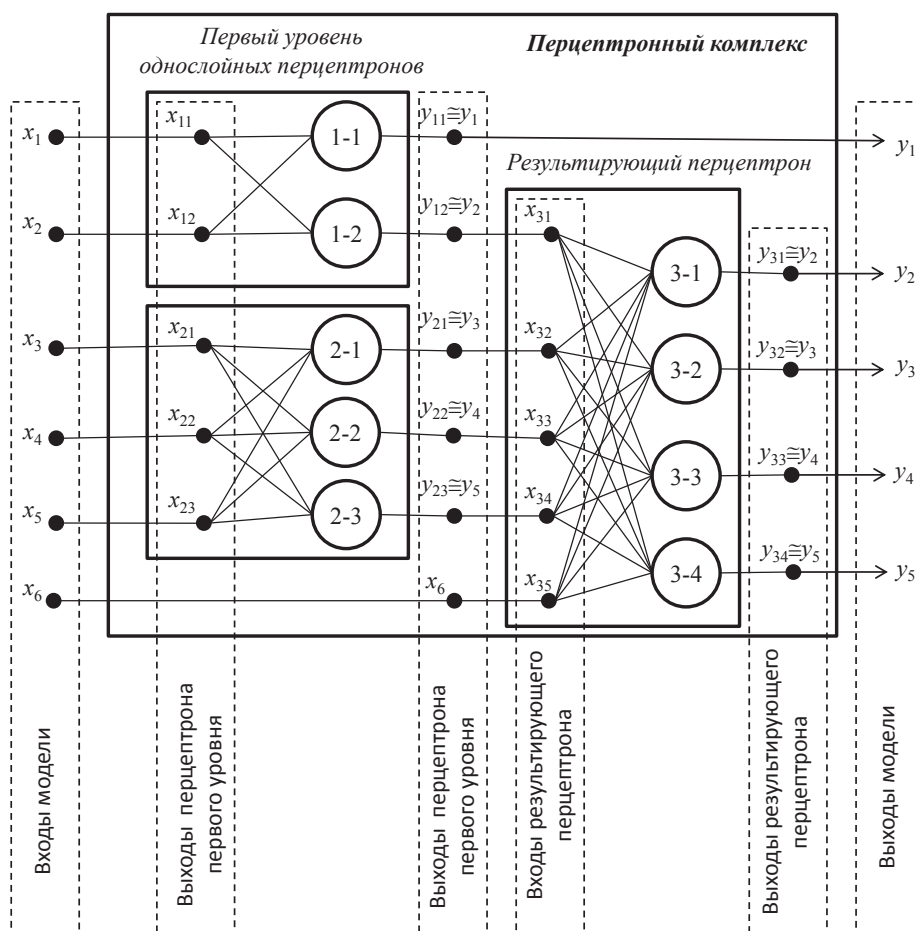


Рис. 1. Общая структура перцептронного комплекса

В нашем случае в качестве простых подмоделей используются однослойные перцептроны, выходы которых служат входами результирующего однослойного перцептрона. Таким образом, в результате получается двухуровневый перцептронный комплекс. Для активации нейрона выбрана нелинейная логистическая функция с параметром насыщения. Однослойный перцептрон

представляет собой слой нейронов, связанных с входными переменными. Количество нейронов равно количеству выходных переменных, за которые отвечает данный перцептрон. Обучение перцептрона сводится к такой настройке его весовых коэффициентов, при которой среднеквадратичная ошибка, рассчитанная для имеющейся экспериментальной выборки, будет минимальной. В ходе работы был проведен анализ различных типовых структур перцептронных комплексов с шестью входами и пятью выходами нейросетевой модели с определением эффективности ее упрощения в сравнении с обычными двухслойным и трехслойным перцептронами [Дударов, Диев, 2013]. При выборе структур обычных перцептронов учитывались коэффициенты смещения каждого слоя нейронов. На основе имеющегося опыта нейросетевого моделирования количество скрытых нейронов двухслойной сети принято равным сумме входных и выходных переменных, а в трехслойной сети число нейронов в первом скрытом слое — равным числу входов и во втором скрытом слое — равным числу выходов. Таким образом, количество настраиваемых весовых коэффициентов обычных двухслойного и трехслойного перцептронов составили соответственно 132 и 107. Результаты проведенного сравнительного анализа приведены в таблице 1.

Из таблицы видно, что использование для моделирования перцептронных комплексов дает значительное уменьшение числа настраиваемых весовых коэффициентов в сравнении с обычными перцептронами и, как следствие, объем требуемых для получения математического описания экспериментальных данных уменьшается в 2.0–3.3 раза. Алгоритм работы с перцептронным комплексом включает три основные стадии:

- выбор структуры и настройка параметров;
- обучение;
- практическое использование.

Выбор структуры и настройка параметров перцептронного комплекса выполняются с учетом имеющегося количественного и качественного состава экспериментальных данных. Поскольку оценить работоспособность выбранных структуры и настроек можно только в результате обучения комплекса, первые две стадии могут выполняться в цикле несколько раз до достижения приемлемого качества обучения (уровня среднеквадратичной ошибки). В ходе процесса обучения первоначально настраиваются весовые коэффициенты каждого перцептрона первого уровня методом коррекции ошибки. При наличии неполной выборки данных для обучения определенного перцептрона используются только те примеры обучающей выборки, для которых имеется полный набор входных и выходных переменных. Следует заметить, что для моделирования на основе обычных многослойных перцептронов использование таких примеров было бы в принципе невозможно. Далее с использованием уже обученных перцептронов первого уровня составляется обучающая выборка для результирующего перцептрона и аналогичным методом проводится его обучение. Практическое использование обученного комплекса осуществляется для обучающего, тестового или любого другого набора данных с учетом областей допустимых значений каждой переменной, соответствующих обучающей выборке.

Алгоритм обучения перцептронного комплекса

Обучение перцептрона в рамках данной работы сводится к решению нескольких задач многомерной оптимизации. В качестве функции цели (критерия) в них выступает среднеквадратичная ошибка отдельных однослойных перцептронов, рассчитанная для соответствующих обучающих выборок: $E = \sqrt{\frac{1}{NK} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^K (y_{ij}^n - y_{ij}^p)^2}$, где N — количество обучающих примеров, K — количество выходов перцептрона. Оптимизируемые переменные — это весовые коэффициенты обучаемых перцептронов. Полный алгоритм обучения перцептронного комплекса представлен ниже.

Таблица 1. Сравнение структур перцептронных комплексов с двухслойными и трехслойными перцептронами

№ п/п	Структура перцептронного комплекса		Количество настраиваемых весовых коэффициентов	Соотношение весовых коэффициентов у комплекса и обычных перцептронов	
	1-й уровень перцептронов	результатирующий перцептрон		двухслойный	трехслойный
1	2 перцептрона с тремя входами в каждом и двумя или тремя выходами, без проскоков	5 входов и 5 выходов, без «проскоков»	50	0.38	0.47
2	3 перцептрона с двумя входами в каждом и одним или двумя выходами, без проскоков	5 входов и 5 выходов, без «проскоков»	45	0.34	0.42
3	2 перцептрона с двумя или тремя входами и двумя или тремя выходами, 1 проскок входа	6 входов и 5 выходов, без «проскоков»	53	0.40	0.50
4	2 перцептрона с тремя входами в каждом и двумя или тремя выходами, без проскоков	4 входа и 4 выхода, 1 «проскок» выхода	40	0.30	0.37
5	2 перцептрона с двумя или тремя входами и двумя или тремя выходами, 1 проскок входа	5 входов и 4 выхода, 1 «проскок» выхода	42	0.32	0.39

1. На основе серии экспериментов составляется исходная выборка данных для обучения перцептронного комплекса, включающая полный набор примеров со всеми имеющимися входными и выходными значениями. Если для какого-либо опыта данные по одной или нескольким переменным отсутствуют, соответствующие поля выборки остаются пустыми. Значения переменных нормализуются в пределах $[-1, 1]$.
2. Задается структура перцептронного комплекса: количественный и качественный состав переменных перцептронов первого и второго уровней.
3. Для каждого перцептрона первого уровня:

- 3.1) на основе исходной выборки (п. 1) составляется обучающая выборка для текущего перцептрона с учетом состава его входных и выходных переменных; если пример исходной выборки был неполным, но содержал значения всех переменных, задействованных в текущем перцептроне, то его данные также включаются в обучающую выборку;
- 3.2) Выполняется итерационный процесс настройки весовых коэффициентов по методу Уидроу–Хоффа, в ходе которого на каждой эпохе обучения на входы сети подаются входные вектора примеров из обучающей выборки; на итерации с номером q для поданных входов по промежуточным значениям весовых коэффициентов рассчитываются выходные переменные y_j^p ; далее находятся отклонения расчетных значений от элементов выходного вектора, соответствующего набору входов использованного обучающего примера: $\Delta_j = y_j^n - y_j^p$, вносятся поправки в весовые коэффициенты синапсов, связанных с j -м нейроном: $w_{ij}^{(q+1)} = w_{ij}^{(q)} + v\Delta_j x_i$; новые значения весовых коэффициентов используются сразу при предъявлении на входы текущего перцептрона следующего примера; одна эпоха обучения включает перебор всех примеров обучающей выборки в случайной последовательности; коэффициент скорости v медленно уменьшается с каждой новой эпохой, благодаря чему к моменту окончания обучения весовые коэффициенты стабилизируются в пределах максимально допустимой погрешности.
4. Для обучения результирующего перцептрона формируется обучающая выборка только на основе полных примеров исходной выборки, так как все входные и выходные переменные прямо или косвенно участвуют в процессе обучения. Элементы входного вектора любого примера рассчитываются с помощью уже обученных перцептронов первого уровня или приравниваются входам модели объекта (при «проскоке» первого уровня). Выходные значения обучающих примеров берутся непосредственно из исходной выборки.
5. Проводится обучение результирующего перцептрона методом Уидроу–Хоффа с уменьшающимся коэффициентом скорости до стабилизации его весовых коэффициентов в пределах заданного значения.

Несмотря на то что у каждого перцептрона комплекса в итоге может быть своя собственная величина ошибки, оценивать качество его обучения следует по величине среднеквадратичной ошибки, учитывающей отклонения всех выходов модели объекта от соответствующих им выходов полных обучающих примеров.

Моделирование свойств композитного материала

Исходная выборка получена из экспериментальных данных [Федосова и др., 2014]. Она включает в себя свойства 30 образцов композитного материала различного состава, полученных при различных температурных режимах вакуумного обжига. На основе этих данных составлена обучающая выборка для моделирования свойств материала с использованием перцептронного комплекса. Выборка содержит 16 неполных примеров (отсутствуют данные по линейной усадке и (или) прочности на изгиб). Характеристика входных и выходных переменных выборки представлена в таблице 2.

В ходе разработки математической модели было рассмотрено несколько различных вариантов структур перцептронных комплексов, представленных в таблице 1. Минимальное значение среднеквадратичной ошибки для нормализованных выходов получено для комплекса с «проскоком» двух входных переменных: суммарного времени промежуточных выдержек и количества

Таблица 2. Сравнение структур перцептронных комплексов с двухслойными и трехслойными перцептронами

№ п/п	Наименование переменной	Тип переменной	Символьное обозначение	Единицы измерения	Диапазон изменения
1	Доля углеродных нанотрубок	входная	x_1	%	0–24
2	Максимальная мощность нагрева вакуумной печи	входная	x_2	кВт	11–13
3	Время нагрева	входная	x_3	ч	3.3–7.5
4	Суммарное время промежуточных выдержек	входная	x_4	ч	2.0–7.0
5	Интервал времени для повышения температуры	входная	x_5	мин	10–30
6	Количество промежуточных выдержек	входная	x_6	шт	1–3
7	Водопоглощение	выходная	y_1	%	0–13.0
8	Линейная усадка	выходная	y_2	%	7.2–17.4
9	Открытая пористость	выходная	y_3	%	0–38.3
10	Плотность	выходная	y_4	г/см ³	2.3–4.0
11	Прочность на изгиб	выходная	y_5	МПа	103–333

промежуточных выдержек. Данная величина ошибки составила 0.058, что приблизительно соответствует относительной ошибке 6%. Индивидуальные ошибки выходов, за исключением линейной усадки, для этой модели также оказались наилучшими из всех рассмотренных. Структура наиболее удачного варианта перцептронного комплекса приведена на рисунке 2.

В таблице 3 приведены результаты оценки моделирующей способности лучшего варианта перцептронного комплекса по каждому выходу модели. Обозначения переменных соответствуют приведенным ранее в таблице 2.

Из таблицы видно, что наибольшую сложность для корректного описания представляет целевое свойство — прочность на изгиб, однако показатель относительной ошибки порядка 12% является очень хорошим для данной величины. Это обусловлено тем, что оценка данной характеристики изучаемого материала имеет наибольшую погрешность измерения. Полученная математическая модель может быть использована для прогнозирования свойств получаемого композитного материала при различных количественном составе исходных компонентов и температурных режимах его обработки. Так, на рисунке 3 показана зависимость прочности на изгиб получаемого армированного композита от доли углеродных нанотрубок. Аналогичные графики могут быть получены и для других пар входных и выходных характеристик.

Таким образом, полученная модель может использоваться для нахождения оптимальных условий создания конструкционного керамического материала, армированного углеродными нанотрубками и обладающего требуемыми целевыми свойствами.

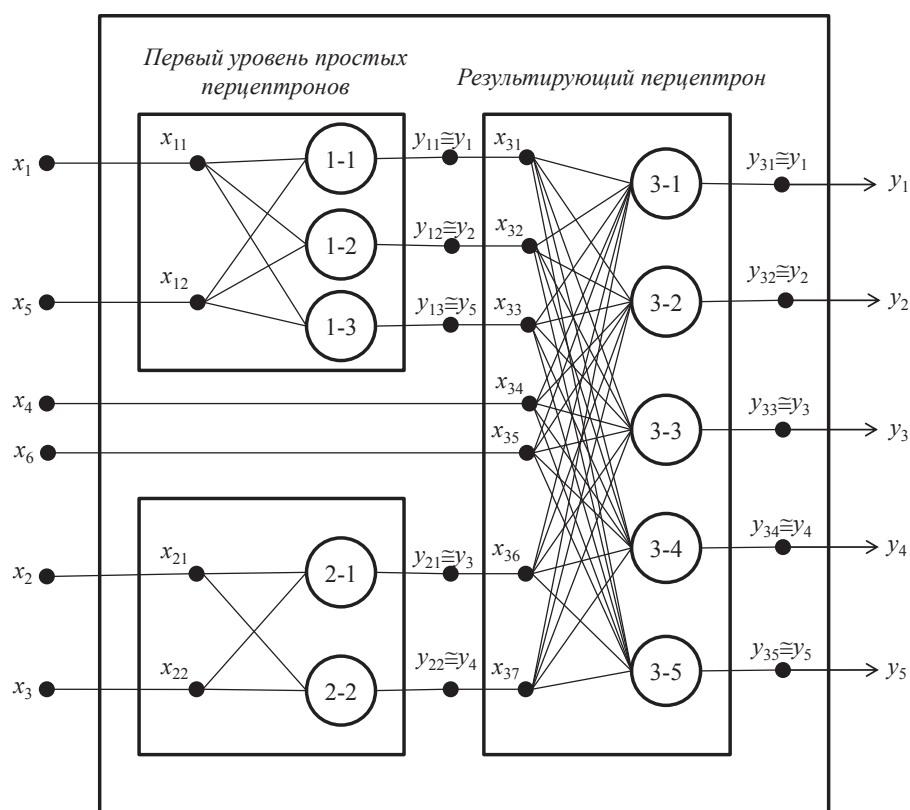


Рис. 2. Структура варианта перцептронного комплекса для моделирования свойств композитного материала с минимальным значением среднеквадратичной ошибки

Таблица 3. Характеристика обучающей выборки

Ошибки	Выходные переменные модели				
	водопоглощение	усадка	пористость	плотность	прочность на изгиб
По нормализованным значениям	0.0033	0.042	0.0042	0.0295	0.118
По значениям в исходных единицах измерения	0.043 %	0.43 %	0.16 %	0.049 г/см ³	27.2 МПа

Выводы

В результате исследования и практического использования перцептронных комплексов для моделирования свойств композитного керамического материала можно сделать заключение об их следующих преимуществах:

- гибкость в организации структуры нейросетевой модели и настройки ее отдельных параметров;
- возможность использовать экспериментальные данные малых объемов;

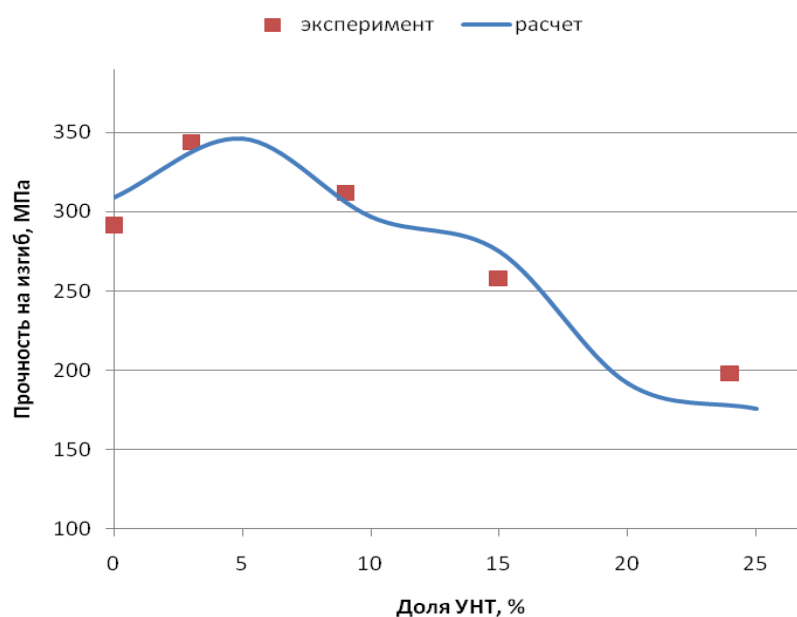


Рис. 3. Результаты моделирования зависимости прочности на изгиб получаемого композита от доли углеродных нанотрубок (максимальная мощность нагрева 11.3 кВт, время нагрева 5.6 ч, суммарное время промежуточных выдержек 4.4 ч, временной интервал повышения температуры 20 мин, количество промежуточных выдержек — 2 шт.)

- возможность использовать неполные экспериментальные данные;
- возможность глубокого анализа данных и выявления скрытых зависимостей;
- возможность эффективного использования данного подхода для решения аналогичных задач моделирования.

Список литературы

- Ивахненко А. Г. Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем. — Киев: Наукова думка., 1982. — 290 с.
- Дударов С. П., Диев А. Н. Нейросетевое моделирование на основе перцептронных комплексов при малых объемах обучающих выборок // Сборник трудов XXVI Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях». — 2013. — Т. 8, секция 7. — С. 114–116. — Нижний Новгород.
- Федосова Н. А., Файков П. П., Попова Н. А., Зыонг Ч. Т. Т., Зараменских К. С., Сovyк Д. М., Кольцова Э. М., Жариков Е. В. Влияние природы углеродных нанотрубок на структуру и прочность керамического композита // Стекло и керамика. — 2014. — № 2. — С. 12–16.