

ОБУЧЕНИЕ НЕЙРОСЕТИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА МАКСИМАЛЬНОГО ЗАПОЛНЕНИЯ ПОЛИМЕРНОЙ ОСНОВЫ МОДЕЛЬНОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ ПОРОШКООБРАЗНЫМИ КОМПОНЕНТАМИ

Г.С. Шаров

georgij-sharov@bk.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Оптимизирован гранулометрический состав перхлората аммония путем вычисления предельной степени объемного наполнения с помощью нейронной сети. Написание кода для нейронной сети осуществлялось с использованием языка программирования Python 3.0 с импортированной библиотекой Keras. Выбраны оптимальные параметры нейронной сети. Применен встроенный в библиотеку Keras метод EarlyStopping в целях устранения проблемы переобучения нейронной сети. Проанализированы результаты работы нейронной сети. Визуализирована полученная зависимость коэффициента максимального заполнения полимерной основы с помощью треугольных диаграмм Гиббса. Установлена актуальность использования нейронных сетей при оптимизации гранулометрического состава модельной энергетической системы.

Ключевые слова

Нейронные сети, перцептрон, искусственный интеллект, Python, Keras, оптимизация гранулометрического состава, предельное объемное наполнение дисперсными частицами, модельная энергетическая конденсированная система

Поступила в редакцию 21.06.2023

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2023

Оптимизация максимального заполнения полимерной основы является одной из главных задач при проектировании энергетических конденсированных систем (ЭКС). Оптимальный фракционный (гранулометрический) состав из нескольких фракций твердых дисперсных компонентов соответствует предельной степени объемного наполнения полимерного связующего. Это, в свою очередь, обеспечивается максимальной плотностью хаотической упаковки частиц (φ_m) наполнителя в насыпном (порошковом) виде.

Известны три основных способа определения φ_m : эксперимент, расчет комбинаторно-мультипликационным методом, расчет симплекс-комбинационным методом [1]. Реализация каждого из перечисленных способов является весьма трудоемкой задачей в силу сложностей при составлении математической модели. Это обусловлено необходимостью использования экспериментальных данных при решении системы уравнений.

В настоящее время развитие компьютерных технологий и искусственного интеллекта позволяет применять нейронные сети для оптимизации грануло-

метрического состава с целью уменьшения числа необходимых расчетных точек без потери точности результатов, а также экстраполяции эмпирических данных на аналогичные по составу, но различные по дисперсности рецептуры.

Цель работы — создать и обучить нейронную сеть, определяющую максимальную плотность хаотической упаковки частиц (φ_m).

В ходе работы поставлены следующие *задачи*:

- 1) создать обучающую выборку на основе экспериментальных данных;
- 2) разработать структурную схему нейронной сети;
- 3) выбрать оптимальные параметры нейронной сети, такие как число эпох, функцию потерь и шаг обучения;
- 4) проанализировать результаты расчета.

Для разработки нейронной сети выбран язык программирования Python 3.0 с импортированной библиотекой Keras. Для решения задач, в которых требуется выявление сложных зависимостей между входными и выходными данными, часто используются полносвязные нейронные сети (перцептроны) [2]. Численность нейронов и их слоев зависит от количества входных данных и выбирается экспериментально [3].

Предельное наполнение полимерного материала твердыми частицами (φ_m) зависит от вектора среднemasовых размеров частиц фракций наполнителя d , вектора пористостей соответствующих фракций K и вектора объемных долей фракций [1]. Выбраны экспериментальные данные из [4, 5] в качестве обучающей выборки для определения φ_m в составах ЭКС с тремя различными фракциями перхлората аммония (ПХА). Таким образом, вектор входных данных состоит из 12 переменных.

Функции активации для каждого нейрона выбирают в зависимости от задачи. Одним из главных требований к ним является наличие градиента, соответствующего входной сумме на нейроне. Поскольку порядок входных значений не превышает единицы, рассматривают сигмоидную (логистическую) функцию, которая принимает значения в пределах от 0 до 1 [6].

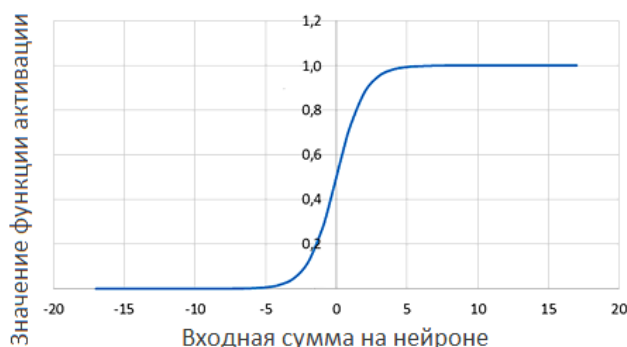


Рис. 1. Сигмоидная функция активации

Дадим некоторые важные определения [7].

Loss-функция (или функция потерь) — это математическая функция, которая измеряет расхождение между прогнозируемыми значениями модели и фактическими значениями целевой переменной в задаче обучения.

Метрика — это числовая характеристика, которая оценивает качество работы модели и позволяет сравнивать разные модели или оценивать модель на тестовых данных без изменения процесса обучения.

В задачах регрессии, в которых модель стремится предсказать непрерывное числовое значение, в библиотеке Keras часто используется метрика MeanSquaredError (среднеквадратическая ошибка). Она измеряет среднее значение квадрата разности между предсказанными и фактическими значениями [8]. Также выбрана одноименная loss-функция.

Одной из главных проблем в обучении нейронных сетей является переобучение — процесс адаптации модели к обучающей выборке. В результате адаптации модель теряет способность обобщения знаний на новые данные. Для предотвращения переобучения в библиотеку Keras встроен метод EarlyStopping [9]. В процессе обучения сравниваются метрики производительности модели на обучающей выборке после каждой эпохи. Если производительность на валидационном наборе перестает улучшаться, то обучение прерывается.

Экспериментально подобрано число эпох, а также необходимые параметры для метода EarlyStopping. На рис. 2 показан процесс обучения нейронной сети, представленный в виде зависимости loss-функции от числа эпох.

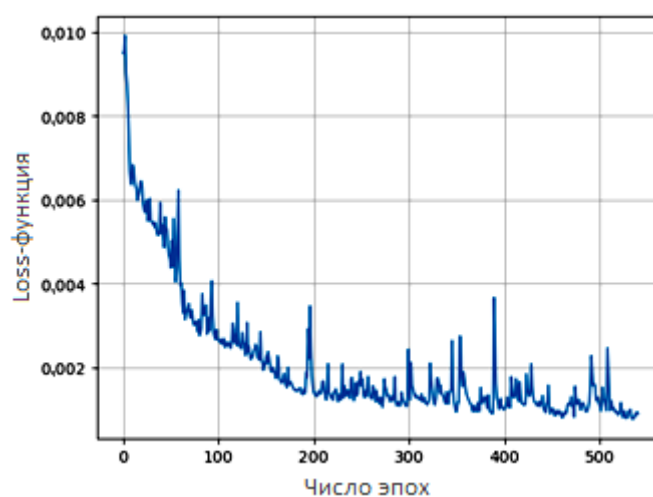


Рис. 2. Процесс обучения нейронной сети

Шумы на графике обусловлены относительно большим установленным шагом сходимости (большой скоростью обучения) [10]. Это объясняется тем, что установка низкого шага приводит к следующим проблемам:

1) возникает вероятность неспособности модели корректно обновлять веса и адаптироваться к новым данным. Это приводит к плохой обобщающей способности и переобучению нейросети;

2) алгоритм оптимизации может «застрять» в локальных минимумах функции потерь. Увеличенный шаг сходимости позволяет модели «перепрыгивать» через них и таким образом находить глобальный минимум.

Исходные данные для расчета представлены в табл. 1.

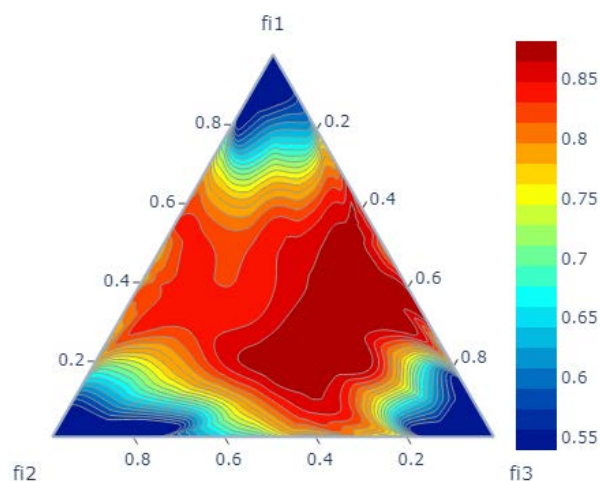
Результаты расчета представлены в табл. 2 и визуализированы на рис. 3.

Таблица 1. Исходные данные для расчета φ_m

Номер смеси	Диаметр частиц D , мкм	Коэффициент пористости
1	200; 80; 1	0,818; 0,623; 0,61
2	150; 50; 1	0,8; 0,623; 0,61
3	10; 6; 3	0,67; 0,62; 0,61

Таблица 2. Результаты расчетов φ_m

Номер смеси	Соотношение фракций	φ_m
1	0,2; 0,3; 0,5	0,881
2	0,3; 0,3; 0,4	0,87
4	0,4; 0,3; 0,3	0,685



a

Рис. 3 (начало). Результаты работы нейронной сети по определению коэффициента φ_m :

a — для смеси 1

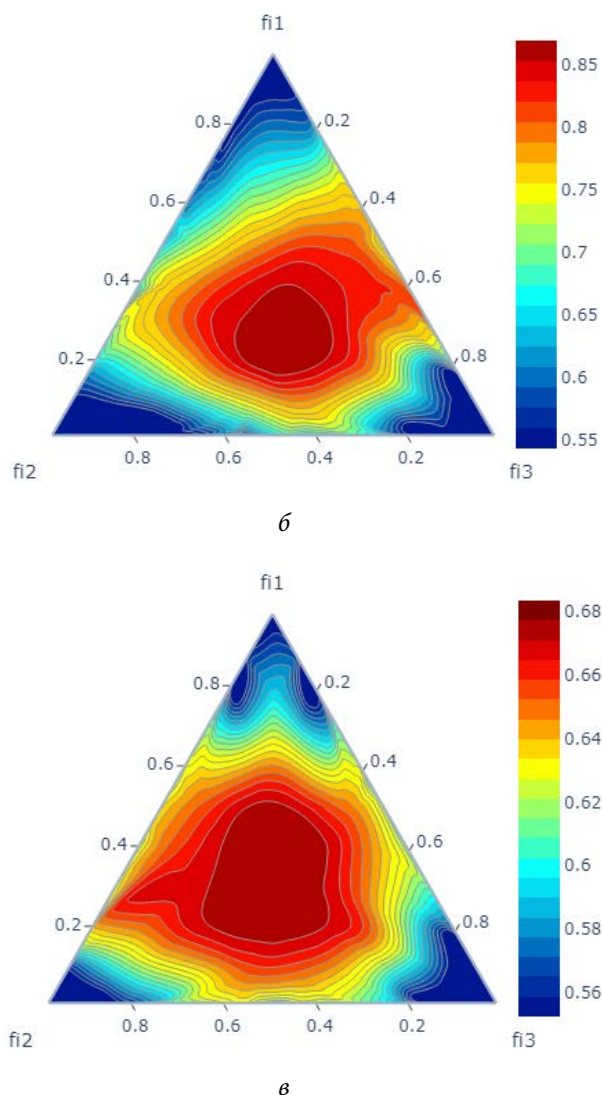


Рис. 3 (окончание). Результаты работы нейронной сети по определению коэффициента φ_m :
 б — для смеси 2; в — для смеси 3

В результате проделанной работы установлена зависимость предельной степени объемного наполнения от объемного содержания фракции, коэффициента пористости и диаметра частиц фракции. Более широкое распределение частиц по размерам соответствует более высоким значениям φ_m вследствие заполнения мелкими частицами промежутков между более крупными частицами.

Внедрение нейросетей для анализа и выбора оптимального состава ЭКС может значительно упростить процесс проектирования и снизить затраты на экспериментальные исследования ракетных двигателей на твердом топливе.

Литература

- [1] Ермилов А.С. *Теоретические основы процессов получения и переработки полимерных материалов*. Пермь, Перм. гос. техн. ун-т, 2009, 159 с.
- [2] Минский М., Пейперт С. *Перцептроны*. Москва, Мир, 1971, 261 с.
- [3] Латкина И.И. Обзор возможностей TensorFlow для решения задач машинного обучения. *Инноватика*, 2015, № 1, с. 33–42.
- [4] Аликин В.Н., Вахрушев А.В., Голубчиков В.Б. и др. *Твердые топлива реактивных двигателей*. Москва, Машиностроение, 2011, т. 4, 380 с.
- [5] Нуруллаев Э.М., Ермилов А.С., Гуров Д.С. Оптимизация гранулометрического состава твердых дисперсных наполнителей полимерных композиционных материалов. *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Аэрокосмическая техника*, 2013, № 34, с. 108–123.
- [6] МакГрат М. *Программирование на Python для начинающих*. Москва, Эксмо, 2015, 192 с.
- [7] Толмачев С.Г. *Системы искусственного интеллекта. Нейросетевые модели*. Санкт-Петербург, БГТУ, 2011.
- [8] *Метрики в задачах машинного обучения*. URL: <https://habr.com/ru/company/ods/blog/328372/> (дата обращения 15.02.2023).
- [9] *Keras: The Python Deep Learning library*. URL: <https://keras.io/> (дата обращения 22.04.2023).
- [10] Платонов А.В. *Машинное обучение*. Москва, Юрайт, 2023, 85 с. URL: <https://urait.ru/bcode/520544> (дата обращения 22.04.2023).

Шаров Георгий Сергеевич — студент кафедры «Ракетные двигатели», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Научный руководитель — Федотова Ксения Викторовна, кандидат технических наук, доцент кафедры «Ракетные двигатели», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Шаров Г.С. Обучение нейросети для определения коэффициента максимального заполнения полимерной основы модельной энергетической конденсированной системы порошкообразными компонентами. *Политехнический молодежный журнал*, 2023, № 08 (85). <http://dx.doi.org/10.18698/2541-8009-2023-8-927>

NEURAL NETWORK LEARNING TO DETERMINE THE MAXIMUM FILLING COEFFICIENT OF THE MODEL ENERGY CONDENSED SYSTEM POLYMER BASE WITH THE POWDER COMPONENTS

G.S. Sharov

georgij-sharov@bk.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

The granulometric composition of ammonium perchlorate was optimized by calculating the limiting degree of volumetric filling using a neural network. The code for the neural network was written using the Python 3.0 programming language with the imported Keras library. Optimal parameters of the neural network were selected. The EarlyStopping method built into the Keras library was applied in order to eliminate the problem of the neural network relearning. Results of the neural network operation were analyzed. The resulting dependence of the coefficient of the polymer base maximum filling was visualized using the triangular Gibbs diagrams. Relevance of introducing the neural networks in optimization of the modern energy system granulometric composition was established.

Keywords

Neural networks, perceptron, artificial intelligence, Python, Keras, granulometric composition optimization, limiting volumetric filling with dispersed particles, model energy condensed system

Received 21.06.2023

© Bauman Moscow State Technical University, 2023

References

- [1] Ermilov A.S. *Teoreticheskie osnovy protsessov polucheniya i pererabotki polimernykh materialov* [Theoretical foundations of the processes of obtaining and processing polymeric materials]. Perm, PSTU Publ., 2009, 159 p. (In Russ.).
- [2] Minsky M., Papert S. *Perceptrons*. The MIT Press, 1969, 258 p. (Russ. ed.: Minskiy M., Peypert S. *Perseptrony*. Moscow, Mir Publ., 1971, 261 p.).
- [3] Latkina I.I. An overview of TensorFlow capabilities for solving machine learning problems. *Innovatika*, 2015, no. 1, pp. 33–42. (In Russ.).
- [4] Alikin V.N., Vakhrushev A.V., Golubchikov V.B. et. al. *Tverdye topliva reaktivnykh dvigateley* [Solid jet fuels]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2011, vol. 4, 380 p. (In Russ.).
- [5] Nurullaev E.M., Ermilov A.S., Gurov D.S. Optimization of grading of polymer composites solid dispersed fillers. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Aerokosmicheskaya tekhnika*, 2013, no. 34, pp. 108–123. (In Russ.).
- [6] MakGrat M. *Programmirovaniye na Python dlya nachinayushchikh* [Python programming for beginners]. Moscow, Eksmo Publ., 2015, 192 p. (In Russ.).
- [7] Tolmachev S.G. *Sistemy iskusstvennogo intellekta. Neyrosetevye modeli* [Artificial intelligence systems. Neural network models]. Saint Petersburg, BSTU Publ., 2011. (In Russ.).
- [8] *Metriki v zadachakh mashinnogo obucheniya* [Metrics in machine learning problems]. URL: <https://habr.com/ru/company/ods/blog/328372/> (accessed February 15, 2023).

- [9] *Keras: The Python Deep Learning library*. URL: <https://keras.io/> (accessed April 22, 2023).
[10] Platonov A.V. *Mashinnoe obuchenie* [Machine learning]. Moscow, Yurayt Publ., 2023, 85 p. URL: <https://urait.ru/bcode/520544> (accessed April 22, 2023).

Sharov G.S. — Student, Department of Rocket Engines, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Scientific advisor — Fedotova K.V., Ph. D. (Eng.), Associate Professor, Department of Rocket Engines, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

Please cite this article in English as:

Sharov G.S. Neural network learning to determine the maximum filling coefficient of the model energy condensed system polymer base with the powder components. *Politekhnicheskij molodezhnyy zhurnal*, 2023, no. 08 (85). (In Russ.). <http://dx.doi.org/10.18698/2541-8009-2023-8-927>