

А.А. Бакулин, магистрант;
С.В. Фомин, проректор по междуна. деятельности, д-р хим. наук;
Ростовцев В.С., доц., канд. техн. наук;
Широкова Е.С., доц., канд. хим. наук. (ВятГУ, г. Киров)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КАЧЕСТВА ИЗДЕЛИЙ НА ОСНОВЕ ЭЛАСТОМЕРОВ С ПОМОЩЬЮ СВЕРТОЧНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Применительно к изготовлению изделий из эластомеров под улучшением качества понимается улучшение определенных свойств материала, например, таких как прочность при растяжении и относительное удлинение при разрыве. Для достижения необходимых эксплуатационных характеристик необходимо, прежде всего, правильно подобрать состав резиновой смеси. Поиск состава резиновой смеси состоит из последовательных шагов: выбор компонентов и расчет их количества; изготовление образца; проведения экспериментов; анализ результатов, на основании которого определяется необходимо повторять процесс изготовления образца с другими компонентами или нет [1,2].

Очевидно, что процесс разработки оптимального состава материала итеративен, что приводит к необходимости проведения большого количества эксперимента. С целью уменьшения временных затрат изготовления изделий из эластомеров с требуемыми характеристиками можно использовать компьютерное моделирование.

Авторами предлагается провести определение параметров качества эластомеров на основе компьютерного моделирования путем разработки и использования сверточной нейронной сети (СНС). Целью экспериментальных работ на базе СНС является оценка эффективности нейросетевого моделирования, используя показатели рецептуры резиновой смеси в условиях ограниченного объема обучающей выборки с оценкой среднеквадратичной ошибки прогнозирования.

Экспериментальным путем была подготовлена обучающая выборка студентами кафедры электронных вычислительных машин и кафедры химии и переработки полимеров ВятГУ. Объем выборки составил 84 строки, в каждой из которой были учтены состав (входные параметры) и свойства (выходные параметры) эластомерных материалов, оцененные экспериментальным путем. Затем авторами было предложено применить метод аугментации для увеличения обучающей выборки, в результате которого удалось довести количество примеров до 2564. Всего было использовано три выходных и десять

входных параметров.

Далее все данные были разделены в отношении: 70% - обучающая выборка, 15% – тестовая выборка и 15% – валидационная выборка.

Эксперименты проводились на сверточной нейронной сети, специально разработанной для этих целей [3].

Выбрана наилучшая архитектура сверточной нейронной сети с двумя сверточными слоями и тремя полносвязными слоями и входной матрицей 3x4 для сверточного слоя в библиотеке keras.

На последнем этапе был проведен автоматический подбор гиперпараметров для наилучшей архитектуры [4], которая обеспечивает автоматический подбор десяти 10 характеристик СНС: функции активации сверточных и полносвязных слоев, количество фильтров в сверточных слоях, количество нейронов в полносвязных слоях, функции регуляризации после каждого слоя, функцию оптимизации.

В результате сверточная нейронная сеть с автоматически подобранными гиперпараметрами показала наилучшие результаты по критерию среднеквадратичной ошибки (RMSE 24.147 и MAE 14.327).

Заключение

1. Показана возможность использования искусственных нейронных сетей для нейросетевого моделирования показателей рецептур материалов на основе эластомеров (резин).

2. Анализ современных литературных источников показывает, что перспективным подходом для решения задачи прогнозирования показателей свойств резин является подход с использованием сверточных нейронных сетей.

3. По результатам экспериментальных исследований выбраны гиперпараметры СНС, обеспечивающие итоги прогнозирования свойств резин.

4. Все работы проведены на базе разработанной программы СНС [3] на свободно-распространяемым языком программирования Python.

5. В связи с малым объемом представленных данных по лабораторным испытаниям минерального наполнителя резиновой смеси было выбрано три выходных показателя качества резиновой смеси и десять входных и предложено использовать компьютерные методы аугментации для расширения обучающей выборки.

6. Обучающая выборка была расширена с помощью методов аугментации до 2564 примеров, описывающих физико-химический состав и свойства резиновой смеси образца и обеспечила экспериментальное моделирование.

7. Перспективным является еще одна задача – это обратная задача поиска необходимых компонентов резиновой смеси по заданным свойствам, которые должен обеспечивать материал.

ЛИТЕРАТУРА

1 Szegedy, C. Inception-v4, Inception-ResNet and the Impact of Residual Connections on Learning / C. Szegedy, S. Ioffe, V. Vanhoucke, A. Alemi – Маунтин-Вью : Google Inc., 2016. – 12 с.

2 Гартман Т. Н. Аналитический обзор современных пакетов моделирующих программ для компьютерного моделирования химико-технологических систем, Успехи в химии и химической технологии. Том XXVI / Т. Н. Гартман, Ф.С. Советин – Москва : Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, 2012 – С. 117- 121.

3 Ростовцев В.С., Бакулин А.А. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ. Программа моделирования характеристик продукции химических производств на основе сверточной нейронной сети. Заявка №2021610789 от 29.01.2021.

4 Ростовцев В.С., Черемисинова О.Н. Повышение качества распознавания изображений подбором параметров сверточной нейронной сети, 52я Международная научная конференция Евразийского Научного Объединения (июнь 2019). «Евразийское Научное Объединение» №6(52) Июнь, Часть 2, 2019 С. 114-118. (Дата обращения: 15.05.2019).