

Применение искусственных нейронных сетей в задачах классификации многокомпонентных сплавов

О.С. Нургаянова
Факультет информатики и робототехники
Уфимский государственный авиационный
технический университет
Уфа, Россия
e-mail: onurgayanova@yandex.ru

Аннотация¹

В статье рассматриваются вопросы классификации жаропрочных никелевых сплавов с монокристаллической структурой, применяемых в авиационной промышленности для изготовления лопаток газотурбинных двигателей. В качестве инструмента для классификации используются искусственные нейронные сети.

Задачи классификации и кластеризации, искусственные нейронные сети, сеть Кохонена, алгоритм классификации KNN (ближайшего соседа), меры близости классов/кластеров.

1. Введение

В современном мире, с постоянной гонкой вооружений и технологий, разработка новых материалов с более высокими свойствами представляет актуальную проблему. Безусловно, в первую очередь, это относится к сферам авиационного и космического двигателестроения, а также глубинного бурения и задачам, связанным с добычей и переработкой полезных ископаемых.

Для того чтобы достичь максимально возможный КПД двигателей и установок преследуют цель увеличения рабочей температуры в системе и уменьшение отвода тепла. Напрашивается очевидный выход – для этих систем требуются стойкие при высоких температурах (до 1500-2000 °С) материалы. При изготовлении литых деталей в авиационном двигателестроении и буровых установках применяются многообразные сплавы особого назначения (жаропрочные, жаростойкие, износостойкие и др.). Максимальная температура газов перед турбиной ограничивается жаропрочностью материала, из которого делают ее элементы. Применение охлаждаемых лопаток из специальных сплавов позволило повысить ее до

1400–1500 °С в авиации (особенно на самолетах-перехватчиках, где ресурс двигателя мал) и до 1050–1090 °С в стационарных газотурбинных установках, предназначенных для длительной работы [1, 2]. Таким образом, очевидно, что сфера применения тех или иных материалов, все же вносит свои корректировки.

Разработка новых материалов зачастую связана с опытом и чутьем исследователя и требует значительных материальных и временных затрат, это и многократные выплавки опытных образцов, и использование дорогостоящего оборудования, и последующие мероприятия, связанные с их испытаниями на прочностные характеристики и проведение различного рода анализов (рентгеноструктурный, физико-химический и т.д.) [1, 3]. При выборе материалов для изготовления той или иной детали полагаются не только на технические требования к ней, но и руководствуются принципом минимальных затрат. Таким образом, имея сведения о химическом составе и свойствах уже известных и используемых жаропрочных сплавов можно классифицировать их по тем или иным характеристикам, что в дальнейшем позволит сузить область поиска и повысить эффективность процесса выбора.

2. Описание задачи

Исследования показали, что жаропрочность сплавов зависит от прочности межатомных связей, структуры и состояния границ зерен. Определенно решающая роль в достижении высокой жаропрочности принадлежит характеру взаимодействия сосуществующих фаз. Но, не смотря на все выявленные учеными принципы легирования жаропрочных сплавов, пока не удается получить конкретных количественных рекомендаций для выбора состава новых сплавов, а так же отнесения их к определенному классу жаропрочности. По-прежнему основным методом для решения этих задач остается эмпирический метод проб и ошибок, который является крайне затратным и неоптимальным [1, 3, 4].

В связи с этим возникает необходимость в систематизации, обобщении, анализе результатов

Труды Шестой всероссийской научной
Конференции "Информационные технологии
интеллектуальной поддержки принятия
решений", 28-31 мая, Уфа-Ставрополь, Россия,
2018

Всероссийская научная конференция "Информационные технологии интеллектуальной поддержки принятия
решений", Уфа-Ставрополь, Россия, 2018

исследований по проблеме синтеза жаропрочных сплавов и автоматизации процесса их классификации. Безусловно, тип данной задачи относится к классу Data Mining, а именно решению задачи классификации/кластеризации [8, 9]. В целом процесс решения можно разбить на следующие подзадачи:

- 1) формирование обучающей выборки, которая будет содержать: название сплава, распределение его химического состава из 16 элементов (указывается процентное содержание), значение 100-часовой жаропрочности при 1000 °С. Эта выборка будет подаваться на вход для обучения системы.
- 2) формирование выборки для классификации, которая будет содержать: название сплава, распределение его химического состава из 16 элементов (указывается процентное содержание).
- 3) формализация степени влияния групп легирующих элементов на жаропрочность сплава.
- 4) так как к вопросу классификации жаропрочных сплавов было решено подойти разными способами, то следующим этапом будет выбор метода классификации. Будут рассмотрены два интеллектуальных метода: метод ближайшего соседа, кластеризация с помощью сети Кохонена.
- 5) выбор параметров классификации/кластеризации – количество соседей (для метода ближайшего соседа), мера близости между классами/кластерами для обоих методов.
- 6) классификация/кластеризация выбранным методом – сопоставление сплавов из выборки для классификации с классами для метода ближайшего соседа, с кластерами для метода Сетей Кохонена.
- 7) анализ и рекомендации использования полученных результатов разбиения.

Дадим более четкое пояснение терминам, используемым выше:

- задача **классификации** сводится к определению класса объекта по его характеристикам. В этой задаче множество классов, к которым может быть отнесен объект, известно заранее;
- в задаче **кластеризации** отнесение каждого из объектов данных осуществляется к заранее неопределенным классам. Разбиение объектов и формирование кластеров происходит одновременно.

Задача классификации относится к стратегии обучения с учителем. Различают два основных типа классификации:

- искусственная классификация – производится по внешнему признаку и служит для придания множеству предметов (процессов, явлений) нужного порядка;
- естественная классификация – производится по существенным признакам, характеризующим внутреннюю общность предметов и явлений. Она является результатом и важным средством научного исследования, т.к. предполагает и закрепляет результаты изучения закономерностей, в том числе латентных, классифицируемых объектов.

В данной статье рассматриваемая задача относится к типу многомерной естественной классификации, т.е. осуществляется по множеству признаков. Цель процесса классификации состоит в том, чтобы построить модель, использующую прогнозирующие атрибуты в качестве входных параметров и получает значение зависимого атрибута. Процесс классификации – разбиение множества объектов на классы по одному или множеству критериев.

В свою очередь кластеризация относится к стратегии обучения без учителя. Цель процесса кластеризации заключается в поиске существующих структур. Кластеризация является описательной процедурой и дает возможность провести разведочный анализ и изучать «структуру данных» [1, 5].

3. Описание моделей и алгоритмов

Математическая модель задачи *классификации*:

Дано: Множество неклассифицированных элементов N , которые имеют множество признаков P , множество классов C . Задана обучающая выборка M , на которой задано отображение $c *: M \rightarrow C$ с учетом признаков P .

Найти: распределение элементов множества N по элементам множества C с учетом критериев (признаков P).

Применение метода « k -ближайших соседей» для классификации жаропрочных сплавов

Дано:

- 1) репрезентативная обучающая выборка N , состоящая из n - сплавов с известной жаропрочностью;
- 2) каждый элемент обучающей выборки – сплав, содержащий информацию о распределении химического состава из 16 элементов;
- 3) для каждого из 16 химических элементов указан коэффициент влияния на суммарный эффект жаропрочности;
- 4) заданы диапазоны значения жаропрочности для трех классов – максимальной, средней, минимальной жаропрочности;
- 5) выборка M из m -сплавов с неизвестной жаропрочностью;
- 6) каждый элемент выборки неклассифицированных сплавов – сплав, содержащий информацию о распределении химического состава из 16 химических элементов.

Требуется определить класс жаропрочности для каждого из сплавов в выборке M на основании анализа выборки N с использованием метода « k -ближайших соседей» [5].

Описание алгоритма:

Шаг 1. Анализируется обучающая выборка и разделяется по классам жаропрочности на основании заданных диапазонов.

Шаг 2. Задать количество ближайших соседей k .

Шаг 3. Взять элемент из выборки M – вектор A_s , найти расстояние от него до каждого элемента в обучающей выборке N одним из способов:

1) расстояние с использованием Евклидовой меры близости с учетом степени влияния элементов – взвешенное Евклидово расстояние:

$$d_i = \sqrt{\sum_{j=1}^C Z_j * (A_{sj} - B_{ij})^2},$$

где d_i – расстояние между двумя объектами: неклассифицированным A_s и из обучающей выборки $B_i, i = 1 \dots N$;

C – число элементов, характеризующих объект – химические элементы, входящие в состав сплава;

Z – список коэффициентов влияния каждого химического элемента, $j = 1 \dots C$.

2) расстояние с использованием Манхэттенской меры близости с учетом степени влияния элементов – взвешенное Манхэттенское расстояние:

$$d_i = \sum_{j=1}^C Z_j * |A_{sj} - B_{ij}|,$$

где d_i – расстояние между двумя объектами: неклассифицированным A_s и из обучающей выборки $B_i, i = 1 \dots N$;

C – число элементов, характеризующих объект – химические элементы состава сплава;

Z – список коэффициентов влияния каждого химического элемента, $j = 1 \dots C$.

Шаг 4. Выбрать из списка расстояний D k -минимальных расстояний и определить по ним k -ближайших соседей.

Шаг 5. Провести взвешенное голосование относительно показаний k -ближайших соседей по их значениям критерия «Класс жаропрочности». Взвешенное голосование в данном случае учитывает не только показания соседей, но и расстояние до них, во избежание неопределенности, когда несколько классов набирают одинаковое количество голосов. Чем меньше расстояние до «соседа», тем его голос более значим:

$$votes(class) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{d_i^2},$$

где d_i^2 – квадрат расстояния от неклассифицированного сплава A_s до сплава из обучающей выборки B_i , принадлежащего классу $class$.

Шаг 6. Класс, набравший большее количество голосов присваивается сплаву A_s , который добавляется в выборку классифицированных сплавов N и удаляется из выборки M .

Повторять шаги 2–6 до тех пор, пока выборка M не опустеет.

Особенность этого метода заключается в том, что каждый классифицированный в процессе работы алгоритма сплав расширяет обучающую выборку, и каждый следующий неопознанный сплав распознается на основании всех предыдущих и новых объектов. Алгоритм устойчив к аномальным выбросам, так как вероятность попадания такой записи в число k -ближайших соседей мала, но даже в этом случае влияние выбросов на взвешенное голосование будет незначительным [5]. Полученные результаты достаточно легко интерпретировать.

Более наглядно описанный алгоритм демонстрируется блок-схемой на рисунке 1:

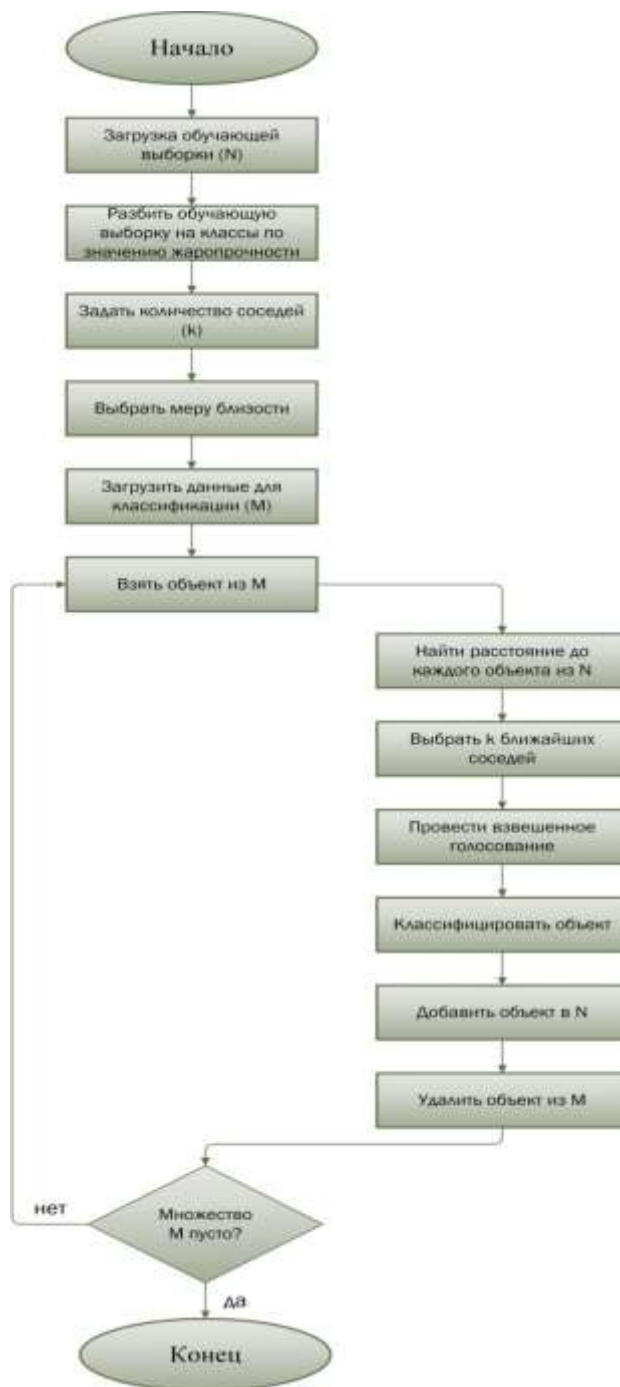


Рис. 1. Блок-схема алгоритма классификации методом k -ближайших соседей

Математическая модель задачи **кластеризации**:

Дано: Множество неклассифицированных элементов N , которые имеют множество признаков P .

Найти: оптимальное число кластеров и разбить множество N на непересекающиеся подмножества – кластеры так, чтобы элементы попавшие в один кластер были максимально близки по множеству признаков P .

Применение сетей Кохонена для классификации жаропрочных сплавов

Дано:

- 1) репрезентативная обучающая выборка N , состоящая из n - сплавов для тренировки сети;
- 2) каждый элемент обучающей выборки – сплав, содержащий информацию о распределении химического состава из 16 элементов;
- 3) для каждого из 16 химических элементов указан коэффициент влияния на суммарный эффект жаропрочности;
- 4) выборка M из m -сплавов, которые необходимо классифицировать;
- 5) каждый элемент выборки неклассифицированных сплавов – сплав, содержащий информацию о распределении химического состава из 16 элементов.

Требуется разделить на кластеры все сплавы из выборки M по степени близости химического состава с помощью нейронной сети Кохонена, обученной на выборке N .

Описание алгоритма:

Шаг 1. Начальная инициализация нейронной сети.

Нейронная сеть представляет собой множество нейронов – векторов весов. Вектор весов нейрона совпадает с размерностью входных векторов (в нашем случае размерность вектора $u=16$, количеству химических элементов в сплаве). Количество нейронов в сети было принято равным размерности их векторов q , для данной задачи это оптимально. Начальная инициализация сети заключается в присвоении векторам весов нейронов начальных значений, которые в процессе работы алгоритма корректируются, изначально весовые коэффициенты нейронов инициализируются случайными величинами.

В результате, после первого шага получали нейронную сеть – множество нейронов $Neuro$, где каждый нейрон представлял вектор весов:

$$\omega_i = (\omega_{i1}, \dots, \omega_{iu}), i = 1 \dots u.$$

Шаг 2. Обучение нейронной сети – корректировка весовых коэффициентов нейронов. Обучение состоит в последовательной коррекции весовых коэффициентов. На каждом шаге обучения из исходного набора данных обучающей выборки берется один вектор, а затем производится поиск наиболее похожего на него вектора весов нейронов. Наиболее «похожий» нейрон становится победителем. После того, как победитель найден, производится корректировка его весовых коэффициентов, а так же весов его соседей, попадающих в радиус обучения.

Шаг 2.1. Взять элемент из обучающей

выборки N вектор A_s , найти расстояние от него до каждого нейрона в нейросети $Neuro$ одним из способов:

- 1) расстояние с использованием Евклидовой меры близости с учетом степени влияния элементов – взвешенное Евклидово расстояние:

$$d_i = \sqrt{\sum_{j=1}^C Z_j * (A_{sj} - \omega_{ij})^2},$$

где d_i – расстояние между двумя объектами: сплавом A_s из обучающей выборки и вектором весов i -го нейрона $\omega_i, i = 1 \dots q$;

C – число элементов, характеризующих объект – химические элементы состава сплава, длина вектора весов нейрона;

Z – список коэффициентов влияния каждого химического элемента, $j = 1 \dots C$.

- 2) расстояние с использованием Манхэттенской меры близости с учетом степени влияния элементов – взвешенное Манхэттенское расстояние:

$$d_i = \sum_{j=1}^C Z_j * |A_{sj} - \omega_{ij}|,$$

где d_i – расстояние между двумя объектами: сплавом A_s из обучающей выборки и вектором весов i -го нейрона $\omega_i, i = 1 \dots q$;

C – число элементов, характеризующих объект – химические элементы состава сплава, длина вектора весов нейрона;

Z – список коэффициентов влияния каждого химического элемента, $j = 1 \dots C$.

Шаг 2.2. Выбрать из списка расстояний $D_{\text{минимальное}}$, и таким образом определить нейрон-победитель. Выделить соседей нейрона-победителя, попадающих в радиус обучения.

Шаг 2.3. Определить коэффициенты скорости обучения:

- 1) вычислить параметр скорости обучения:

$$\sigma(k) = \sigma_0 * \exp\left(\frac{-k}{\tau_1}\right),$$

где k – номер эпохи обучения,

параметр скорости обучения σ_0 = радиусу решетки,

$$\tau_1 = \frac{1000}{\log \sigma_0} - \text{константа времени.}$$

- 2) вычислить функцию соседства:

$$h(d, k) = \exp\left(\frac{-d^2}{2\sigma^2(k)}\right),$$

где k – номер эпохи обучения,

σ – функция скорости обучения от эпохи k ,

$d_{w,i}^2$ – квадрат расстояния между нейром-победителем вектор весов которого обозначим ω_w и нейроном ω_i , попавшим в радиус обучения, вычисляется евклидовой мерой.

- 3) вычислить функцию скорости обучения:

$$a(k) = a_0 * \exp\left(\frac{-k}{\tau_2}\right),$$

где k – номер эпохи обучения,

$a_0 = 0,1$ – константа обучения,

$\tau_2 = 1000$ – константа времени.

Шаг 2.4. Произвести корректировку весов нейрона победителя и его соседей согласно правилу:

$$\omega_i = (\omega_{ij} + h(d_{w,i}, k) * a(k) * (A_{sj} - \omega_{ij})),$$

где ω_i – вектор весов корректируемого нейрона (который вошел в число соседей победителя или сам им является) $i, j = 1 \dots n$,

$h(d_{w,i}, k)$ – функция соседства корректируемого нейрона и нейрона-победителя (см. Шаг 2.3),

$a(k)$ – функция скорости обучения сети (см. Шаг 2.3),

k – номер эпохи обучения,

A_s – входной вектор-сплав, для которого был определен данный нейрон-победитель.

Когда для каждого сплава из обучающей выборки N будут выполнены шаги 2.1-2.4 – завершится первая эпоха обучения. Эпохи будут повторяться до тех пор, пока функция погрешности не примет приемлемо малое значение.

Шаг 2.5. По завершении каждой эпохи обучения вычислить функцию погрешности:

$$E = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|A_i - \omega_{iw}\|,$$

где n -количество сплавов обучающей выборки N , A_i – сплав из обучающей выборки N , ω_{iw} – вектор весов нейрона победителя для сплава A_i .

Приемлемым значением функции погрешности для данной задачи принято 900, что объясняется большим объемом и размерностью входных данных.

После того как значение функции погрешности стало минимально возможным, сеть считается обученной.

Шаг 3. Произвести кластеризацию объектов множества M .

Взять входной вектор из множества M сплав $B_l, l = 1 \dots t$, найти для него расстояния до каждого нейрона обученной сети одним из способов расчета расстояния (евклидова мера, манхэттенская мера) – получим список расстояний D .

Шаг 4. Найти в списке расстояний D минимальное – определить нейрон-победитель. Присвоить выходной сигнал нейрона-победителя в качестве номера кластера сплава B_l . Выходной сигнал нейрона в данном случае означает его индекс [5].

Более наглядно алгоритм представлен блок-схемой на рис.2.

Таким образом, принцип работы сети Кохонена заключается во введении в правило обучения нейрона информации о его расположении, что в свою очередь позволяет упростить многомерную структуру [7]. Другое принципиальное отличие сетей Кохонена от других моделей нейронных сетей – иной подход к обучению, а именно – неуправляемое или неконтролируемое обучение. Этот тип обучения позволяет данным обучающей выборки содержать значения только входных переменных. Фактически сеть учится понимать саму структуру данных

4. Описание результатов

Вышеописанные алгоритмы были реализованы в виде desktop-приложения на языке C# с использованием технологии WPF. Windows Presentation Foundation (WPF) – подсистема платформы .NET для построения графических интерфейсов.

Программа позволяет выбирать меру близости классов/кластеров. Выбор меры – наиболее важный фактор, влияющий на результаты кластер-анализа. Поскольку в рассматриваемой задаче признаки количественные, то были использованы следующие меры близости – евклидово расстояние и Манхэттенское. В большинстве случаев последнее приводит к результатам, подобным расчетам евклидова расстояния. Однако, для этой меры

влияние отдельных выбросов меньше, чем при использовании евклидовой метрики, поскольку в этом случае координаты не возводятся в квадрат.

Скриншоты работы программы представлены на рисунках 3 – результаты классификации методом ближайшего соседа при количестве соседей 15 и используемой метрике близости – Евклидово расстояние и 4 – результаты кластеризации с помощью нейронной сети Кохонена, где в качестве метры близости было использовано Манхэттенское расстояние.

Исследование частично поддержано грантом РФФИ 18-07-00193-а.

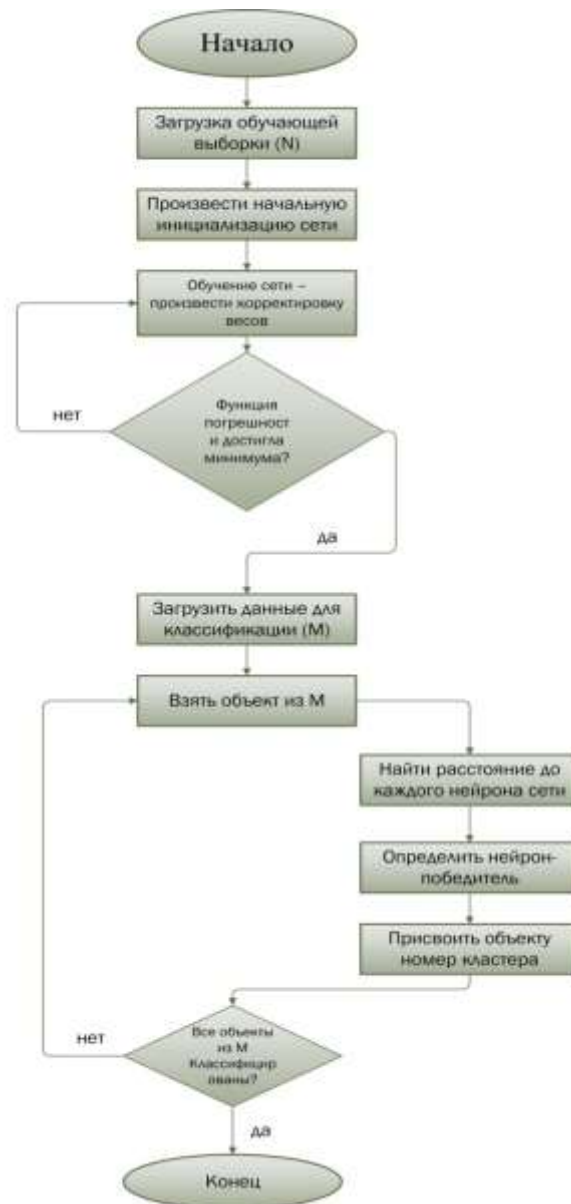


Рис. 2. Блок-схема алгоритма кластеризации с помощью сети Кохонена

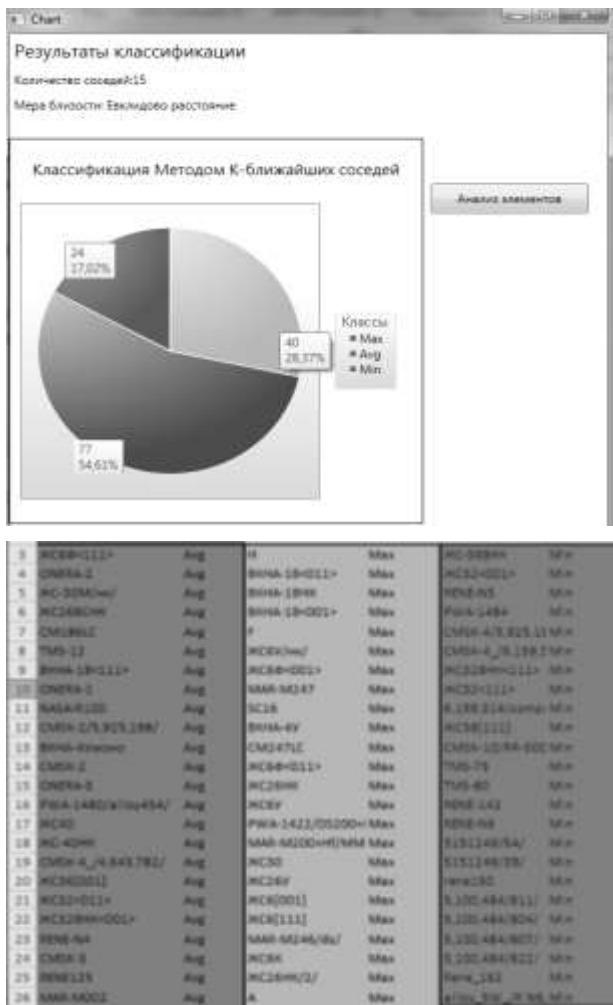


Рис. 3. Результаты классификации методом ближайшего соседа

Список используемых источников

- Нургаянова О. С. Автоматизированное проектирование литейных жаропрочных никелевых сплавов на основе методов искусственного интеллекта: дис. канд. техн. наук. — Уфа, 2006. — С. 15-20.
- Рахманкулов М.М., Паращенко В.М. Технология литья жаропрочных сплавов. М: Интермет-Инжиниринг, 2000 – 464с.
- Моделирование зависимости состав-свойство жаропрочных никелевых сплавов многомерным корреляционным сплайном / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Ползуновский альманах. 2004. № 4. С. 135–137.
- Подходы к автоматизации проектирования новых литейных жаропрочных никелевых сплавов / А.А. Ганеев, О.С. Нургаянова // Вестник алтайского государственного технического университета. 2005. № 3-4. С. 112–115.

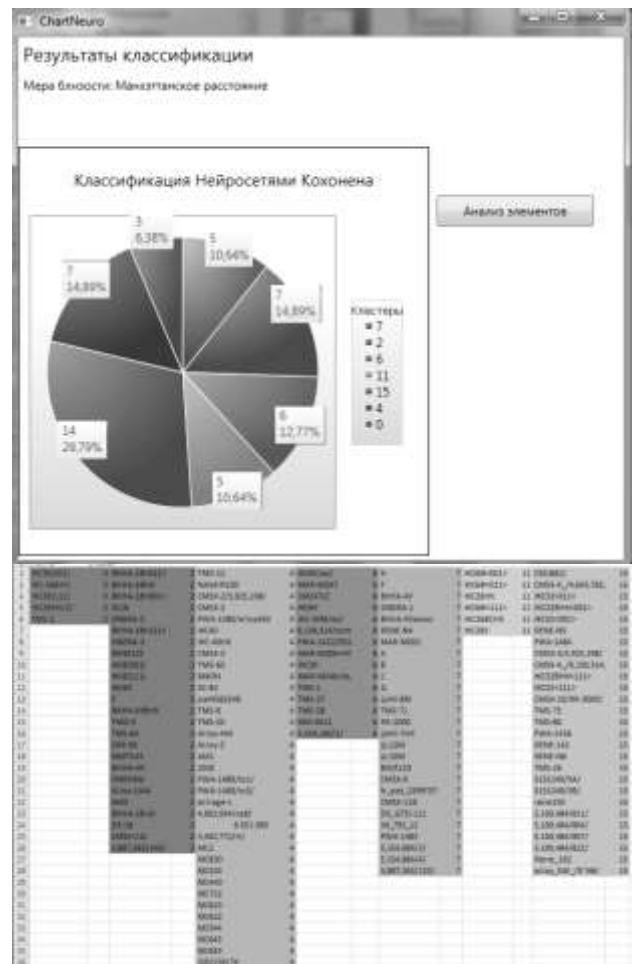


Рис. 4. Результаты кластеризации с помощью нейронной сети Кохонена

- Система автоматизированного проектирования литейных никелевых жаропрочных сплавов с монокристаллической структурой / О.С. Нургаянова, А.А. Ганеев, С.П. Павлинич // Ползуновский альманах. 2006. № 3. С. 22–27.
- Нейронные сети. Полный курс / Саймон Хайкин 2-е изд., испр.: Пер. с англ. М.: ООО И. Д. Вильямс, 2006. 1104 с.
- Кохонен, Т. Самоорганизующиеся карты / Кохонен Т. – Пер. 3-го англ. изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. 655 с.
- Mohammed J. Zaki, Wagner Meira Jr. Data Mining and Analysis. Fundamental Concepts and Algorithms. – Cambridge University Press, 2014. 593 с.
- Ian H. Witten, Eibe Frank and Mark A. Hall. Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques. — 3rd Edition. — Morgan Kaufmann, 2011. — С. 664.