

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ТЕРМООБОРАБОТКИ

Лемзиков А.В., Кундас С.П., Куцьцо В.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, г. Минск
Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова, г. Минск

В настоящее время наметилась тенденция применения искусственных нейронных сетей (ИНС) при моделировании процессов термообработки в качестве элементов, производящих различного рода вычисления [1]. Наиболее востребованной областью, где использование ИНС позволяет достичь существенного прогресса по сравнению с классическим подходом, является решение термодинамических задач, связанных с определением свойств сталей при различных условиях их обработки.

Опыт исследований в рассматриваемой области показывает, что при моделировании такого процесса термообработки, как закалка, для уменьшения погрешности получаемых результатов необходимо учитывать эффект фазовых превращений в стали. В настоящее время для этой цели используются известные диаграммы фазовых переходов (термокинетические или изотермические) [2 - 4]. В то же время следует отметить, что не всегда можно найти диаграмму фазовых переходов для конкретной применяемой стали, заданной химическим составом легирующих элементов.

В связи с этим авторами были разработаны и обучены нейронные сети, позволяющие определять температуры, при которых происходит начало (Ac1) и конец (Ac3) образования аустенита в сталях различного химического состава в зависимости от скорости их нагрева, а также температуру начала образования мартенсита при охлаждении (Ms) [5].

В качестве одного из недостатков указанной разработки можно отметить необходимость формирования в диалоговом режиме структуры обучаемой нейросети (указать количество слоев и нейронов в них) до этапа обучения. Структура сети непосредственно влияет на способность ИНС обобщать обучающие данные и, следовательно, от выбора структуры зависит погрешность прогнозирования. В работе [5] проведена серия экспериментов по обучению сетей с различными структурами и на основании анализа их погрешностей осуществлялся выбор оптимальной структуры. Такой подход отличается высокой трудоемкостью и требует определенных навыков от пользователя. Проблема состоит еще и в том, что универсального правила построения ИНС оптимальной архитектуры не существует – произвести точную оценку аппроксимирующих свойств сети выбранной архитектуры можно лишь после ее обучения.

В качестве альтернативного подхода можно предложить использование алгоритма понейронного наращивания на этапе обучения ИНС. В настоящее время существуют деструктивные и конструктивные методы адаптации структуры. Деструктивные методы направлены на уменьшение архитектуры и подробно рассмотрены в работе [6]. Конструктивные методы представляют собой методы наращивания архитектуры ИНС на этапе обучения. К ним и относится предложенный метод понейронного наращивания. Его целью является уменьшение среднеквадратической ошибки аппроксимации ϵ , вычисляемой по формуле (1).

$$\epsilon = \sqrt{\frac{\sum_k N_k (y_k - t_k)^2}{\sum_k N_k - 1}}, \quad (1)$$

где N_k – количество нейронов выходного слоя; y_k – значение k -го выходного нейрона; t_k – эталонное значение k -го выходного нейрона.

Рассмотрим предложенный алгоритм по шагам (рис. 1).

Шаг 1. Формируется нейронная сеть, состоящая из двух слоев: входного и выходного. Числа нейронов в слоях соответствуют количеству входных и выходных переменных соответственно.

Шаг 2. Задаются значения следующих величин: требуемой среднеквадратической ошибки аппроксимации ϵ обучения, количества добавляемых в слой нейронов за одну эпоху обучения N_A , максимального количества нейронов N_N в скрытом слое при наращивании, максимального количества скрытых слоев N_L , количества обучающих итераций в эпохе N_E , а также максимального количества итераций обучения N_T .

Шаг 3. Если обучающая эпоха, включающая N_E итераций, завершена, переход на шаг 4, иначе переход на шаг 8.

Шаг 4. Если при добавлении N_A нейронов в предпоследний слой их количество в нем не превысит максимальное N_N , переход на шаг 5, иначе переход на шаг 6.

Шаг 5. Добавление в последний скрытый слой N_A необученных нейронов. Переход на шаг 8.

Шаг 6. Если при добавлении скрытого слоя количество слоев не превысит максимальное N_L , переход на шаг 7, иначе переход на шаг 8.

Шаг 7. Добавление скрытого слоя с количеством нейронов N_A .

Шаг 8. Для всех обучающих пар осуществляется по одному шагу обучения.

Шаг 9. Определяется ошибка аппроксимации сети ϵ . Если она не меньше предыдущей, переход на шаг 11.

Шаг 10. Осуществляется сохранение состояния сети.

Шаг 11. Если достигнута ошибка меньше требуемой, то переход на шаг 13.

Шаг 12. Если общее количество итераций не превышает N , возврат на шаг 3.

Шаг 13. Если сохраненная ошибка больше текущей, переход на шаг 15.

Шаг 14. Загрузка сохраненного состояния сети.

Шаг 15. Оптимальная структура сети найдена.

Описанный алгоритм реализован в составе модуля нейронных сетей в программном комплексе КМТР Framework [7, 8]. Указанный модуль позволяет создавать, обучать, верифицировать и использовать нейронные сети для аппроксимации произвольных входных зависимостей. После добавления алгоритма понейронного наращивания было произведено переобучение нейронных сетей, прогнозирующих температуры $Ac1$, $Ac3$ и Ms .

Ранее, без применения указанного алгоритма, были получены структуры сетей, показанные в табл. 1.

Таблица 1. Параметры нейронных сетей, созданных ручным способом

Параметр	$Ac1$	$Ac3$	Ms
Структура сети (количество нейронов в слоях)	5-2	7	5-9
Погрешность 1	0,0346	0,0203	0,0644
Погрешность 2	0,0268	0,0194	0,0423
Погрешность 3	0,0336	0,0207	0,0612
Погрешность 4	0,0306	0,0239	0,0396

Обучение нейронных сетей с применением алгоритма понейронного наращивания осуществлялось следующим образом. Создавалась сеть, содержащая один скрытый слой с единственным нейроном в нем. В качестве граничных условий алгоритма наращивания указывались параметры, показанные в табл. 2.

Таблица 2. Значения параметров алгоритма понейронного наращивания

Параметр	Значение
Максимальное число скрытых слоев	3
Максимальное число нейронов в слое	15
Количество добавляемых нейронов за шаг	1
Количество шагов между добавлением нейронов	1 000
Общее число шагов обучения	45 000

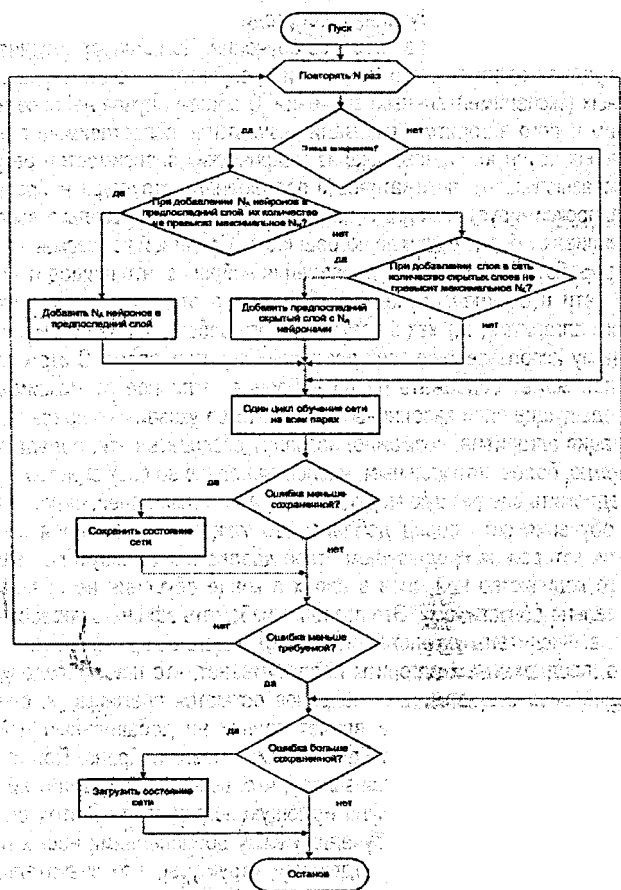


Рисунок 1. Блок-схема алгоритма понейронного наращивания

Максимальное число слоев нейросетей было ограничено значением 3 исходя из теоремы Колмогорова, согласно которой любую p -мерную задачу можно решить с помощью трехслойной нейронной сети имеющей $2p+1$ нейрон в скрытом слое. Максимальное количество нейронов в слое взято равным 15, что примерно соответствует количеству входных параметров исследуемого процесса (12 входов для случая Ас1 и Ас3 и 15 для Мs).

Результаты обучения ИНС с применением алгоритма понейронного наращивания приведены в табл. 3.

Таблица 3. Параметры ИНС, созданных с применением разработанного алгоритма

Параметр	Ас1	Ас3	Ms
Структура сети	15-15-10	15-15-5	15-15-7
Погрешность 1	0,0279	0,0285	0,0684
Погрешность 2	0,0378	0,0247	0,0505
Погрешность 3	0,0333	0,0236	0,0705
Погрешность 4	0,0376	0,0315	0,0515

Верификация результатов обучения производилась на четырех тестовых наборах данных, которые не участвовали в процессе обучения. Погрешность оценивалась путем вычисления среднеквадратического отклонения результатов прогнозирования нейросети от эталонных (экспериментальных) значений. В общем случае нейросети, обученные с применением нового алгоритма, показали результаты, сопоставимые с результатами сетей, созданных вручную. Однако анализ графических зависимостей результатов верификации показывает, что автоматически подобранная структура нейронной сети более близко аппроксимирует исходные данные, но имеются несколько всплесков, которые и обуславливают более высокую погрешность. Причиной всплесков может быть недостаточно проработанный критерий добавления нейронов, что приводит к чрезмерному разрастанию сети и ее «переобучению». Это можно отметить в качестве недостатка предложенного алгоритма, так как в результате его работы нейросеть имеет тенденцию к максимальному использованию всех доступных скрытых слоев. В этом случае только последний слой может содержать число нейронов, отличное от максимального, в то время как предыдущие слои заполнены нейронами до указанного предела. Определенная модификация алгоритма, возможно, позволит создавать сети, обладающие различным (и, возможно, более оптимальным) числом нейронов во всех скрытых слоях.

Можно предложить следующую модификацию алгоритма понейронного наращивания. В процессе обучения сети перед добавлением каждого нового слоя загружается та структура сети, которая на предыдущем этапе давала наименьшую погрешность. В результате этого количество нейронов в слоях в конце обучения не обязательно будет равно максимально допустимому. Это позволит избежать эффекта переобучения сети, а также снизить вычислительную сложность последующего ее применения.

Кроме того, предложенный алгоритм подразумевает, что при добавлении нейрона в последний слой веса существующих нейронов остаются прежними и, следовательно, последующее обучение в основном влияет только на добавленный нейрон. Можно предложить сбрасывать все веса при добавлении нового нейрона. При этом обучение всей сети с новой структурой начнется заново, что, возможно, позволит ей выйти из устоявшегося режима и уменьшить результирующую погрешность. В этом случае необходимо увеличить количество шагов обучения между добавлениями новых нейронов для гарантированного обучения каждой отдельной структуры, что значительно увеличит время обучения сети в целом, однако такая модификация позволяет достичь меньшей погрешности каждого варианта структуры и, следовательно, более точно подобрать оптимальную структуру нейросети для решения поставленной задачи.

Еще одним вариантом применения автоматизации при разработке структуры нейронных сетей может быть алгоритм автоматического создания различных сетей с заданными входами и выходами. При использовании этого алгоритма пользователь задает количество входов и выходов нейронной сети, диапазоны их изменения и диапазоны изменения количества нейронов в слоях. Программа автоматически генерирует все возможные комбинации нейронных сетей с заданными количествами слоев и нейронов в них и поочередно обучает сети на указанной базе знаний. В этом методе отсутствует необходимость в динамическом изменении структуры нейросетей, что положительно сказывается на достигаемой ими точности прогнозирования. В качестве недостатка предложенного метода можно отметить значительно возросшую вычислительную сложность обучения, а также необходимость вручную производить анализ результатов и выбор оптимальной структуры нейросети.

Следует отметить, что трудоемкость создания нейронной сети, применяя предложенный алгоритм нейронного наращивания, значительно меньше, чем в случае ручного подбора оптимальной структуры. Благодаря высокой автоматизации пользователь получает нейронную сеть, аппроксимирующую исходные данные с точностью, достаточной для дальнейшего применения при минимальных затратах времени на подготовительные работы. В описанном случае погрешности прогнозирования температур Ac1, Ac3 и Ms не превышали 10% в обоих случаях.

Таким образом, использование предложенного алгоритма нейронного наращивания позволяет создавать и обучать нейронные сети, обеспечивающие точность прогнозирования, достаточную для их практического использования в решении задач термообработки. В настоящее время нейронные сети, обученные с применением разработанного алгоритма, применяются в составе программного комплекса ThermoSim 2 [9], предназначенного для моделирования и оптимизации процессов закалки стальных изделий.

Литература

1. Bhadeshia, H.K.D.H. Neural Networks in Materials Science / H.K.D.H. Bhadeshia // ISI International. – Vol. 39. – 1999. – P. 966–979.
2. Кундас С. П., Тонконогов Б. А., Лемзиков А.В., Левашкевич Я. С., Юршевич Ю. Ф., Буйкевич Г. Л. Программный комплекс моделирования процессов термообработки / Проблемы проектирования и производства радиоэлектронных средств / Сборник материалов II Междунар. научн.-техн. конф. 15 - 17 мая 2002 г. - Новополоцк. Т. II. С. 188 - 191.
3. Кундас С. П., Тонконогов Б. А., Лемзиков А.В., Левашкевич Я. С., Гишкелюк И. А., Гурченко П. С. Программный комплекс для моделирования процесса закалки стальных деталей / Технология, оборудование, автоматизация, неразрушающий контроль процессов нагрева и упрочнения деталей на машиностроительных предприятиях. - Мн.: УП "Технопринт", 2002. - 163 с. Ил. С. 109 - 112.
4. Кундас С. П., Тонконогов Б. А., Гишкелюк И. А., Лемзиков А.В., Левашкевич Я. С., Гурченко П. С. Компьютерное моделирование и исследование тепловых полей в металлических деталях в процессе закалки / Материалы, технологии и оборудование для упрочнения и восстановления деталей машин: Тематический сборник. Мн.: УП "Технопринт"; Новополоцк, ПГУ, 2003. – 390 с. С. 166 - 167.
5. Лемзиков А.В., Кундас С.П., Куцыло В.В., Иванов Д.Г. Применение нейросетей для определения характерных точек фазовых превращений в сталях с различным химическим составом / Информатика. - Мн.: №1(13), 2007.
6. Нейроинформатика / Горбань А.Н., Дунин-Барковский В.Л., Кирдин А.Н. и др. - Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН, 1998. - 296с.
7. Кундас С.П., Лемзиков А.В., Иванов Д.Г., Коваленко В.И. Разработка структуры программного комплекса для моделирования технологических систем на основе динамически заменяемых модулей / Известия Белорусской инженерной академии, 2004 г., №1(17)/3 - с. 199-201.
8. Кундас С.П., Лемзиков А.В., Коваленко В.И. Разработка гибридной экспертной системы для прогнозирования процесса закалки / Известия белорусской инженерной академии. - Мн.: №1(19)/1, 2005. – С. 200 – 203.
9. V. Demidovich, S. Kundas, D. Ivanov, A. Lemzikov, F. Tchmilenko Simulation of induction heat treatment as coupling of multiphysics phenomena / Heating by electromagnetic sources. Padua, University of Padua (Italy), 2007.