

Оптимизация нейронных сетей для прогнозирования механических свойств текстильных полимерных композитных материалов*

Малашин И.П.

МГТУ им. Н.Э. Баумана
г. Москва, Российская Федерация
ivan.p.malashin@gmail.com

Масич И.С.

СибГУ им. М.Ф. Решетнева
г. Красноярск, Российская Федерация
is.masich@gmail.com

Аннотация. В данной работе исследуется применение многокритериальных методов оптимизации, включая MOPSO, NSGA II и SPEA2, для оптимизации гиперпараметров искусственных нейронных сетей (ИНС) и метода опорных векторов (МОВ) с целью прогнозирования физических свойств текстильных полимерных композитных материалов (ТПКМ). Процесс оптимизации использует данные о физических характеристиках волокон и тканей, используемых для изготовления этих композитов. С помощью алгоритмов оптимизации мы стремимся повысить точность прогнозирования моделей ИНС и МОВ, что способствует разработке и созданию высокоэффективных текстильных полимерных композитов. Эффективность предлагаемого подхода демонстрируется посредством сравнительного анализа и валидационных экспериментов, подчеркивая его потенциал для оптимизации сложных систем материалов.

Ключевые слова: многокритериальная оптимизация, нейронные сети текстильные полимерные композиты, предсказание физических свойств.

ВВЕДЕНИЕ

Полимерные композитные материалы (ПКМ) – это композитные материалы, состоящие из двух или более компонентов, где итоговый продукт демонстрирует свойства, превосходящие свойства каждого отдельного составляющего материала [1]. ПКМ являются незаменимыми в современном инженерном деле и промышленных приложениях благодаря своим исключительным характеристикам, которые включают в себя лёгкий вес [2], высокую прочность [3] и устойчивость к коррозии [4]. Однако разработка эффективных полимерных композитов требует учёта различных факторов, в частности, состава и структуры.

Для достижения желаемых свойств полимеров необходимо применять многоаспектные подходы, включая выбор оптимальных исходных компонентов, с первоочередным учётом необходимых химических и физических свойств. Это может включать выбор различных полимеров, наполнителей, армирующих материалов и добавок. Тщательная настройка состава и пропорций компонентов в материале может существенно повлиять на его свойства. Это может включать изменение концентрации полимерных компонентов [5]. Кроме того, химическая модификация полимеров [6] может быть использована для изменения их свойств. Это может включать введение функциональных групп и из-

менение молекулярной массы и кристаллической структуры полимера. Различные методы обработки, такие как экструзия, литьё под давлением, прессование и намотка волокна, могут быть использованы для формирования и улучшения свойств полимерных материалов. Более того, добавление наночастиц или нанотрубок в полимерные композиты может значительно улучшить их механические, тепловые и электрические свойства.

Определённые физические характеристики полимеров становятся необходимыми для удовлетворения точных функциональных требований в различных приложениях [7]. Эти характеристики могут включать механические свойства, такие как прочность на растяжение [8], гибкость [9] и ударопрочность [10], наряду с тепловыми характеристиками, такими как теплостойкость [11] и теплопроводность [12]. Таким образом, всестороннее понимание состава и структуры полимерного композита является важнейшим, способствуя настройке свойств в соответствии с требованиями различных приложений.

Один из современных подходов к достижению желаемых свойств ПКМ заключается в применении методов машинного обучения (МО). Алгоритмы МО, такие как нейронные сети, метод опорных векторов и случайные леса, могут анализировать сложные наборы данных, включающие состав материала, параметры обработки и требуемые свойства, чтобы выявлять сложные взаимосвязи и закономерности. Используя эти взаимосвязи, модели МО могут прогнозировать свойства ПКМ, оптимизировать составы материалов и ускорять процесс разработки. Этот подход активно обсуждается и широко исследуется в научной литературе.

Фонтес и др. [13] продемонстрировали эффективность глубоких нейронных сетей (ГНС) в создании модели разрушения волокнистых полимерных композитов (FRP), основанной на данных. Используя экспериментальные данные о разрушении из литературы, была обучена полностью соединённая ГНС с 20 входными и одним выходным элементом. Входные данные включали последовательность укладки ламината, свойства слоёв и условия нагружения, в то время как выходным был вектор длины разрушения. Сравнительный анализ с традиционными теориями, такими как теория Цай-Пиньо [14], показал превосходство ГНС в подгонке экспериментальных данных. Её способ-

* Статья публикуется по рекомендации программного комитета Всероссийской научно-технической конференции "Автоматизация", <https://rusautocon.org>

ность работать с полиномами более высокого порядка делает её ценным инструментом для прогнозирования разрушения ламинированных композитов FRP.

Фахем и др. [15] исследовали влияние пористости на механические свойства полимерных композитов, армированных стекловолокном, с помощью экспериментальных и численных анализов. Характеризация материала включала тест на изгиб трёхточечным изгибом, а моделирование методом конечных элементов исследовало различные сценарии с воздушными пузырьками. Результаты показали значительное снижение нагрузки с увеличением размера пузырьков. Кроме того, искусственная нейронная сеть, усиленная алгоритмом Джая (ИНС-Е JAYA) [16], предсказала снижение нагрузки на растяжение на основе длин трещин, полученных методом расширенных конечных элементов (XFEM). Сравнение с другими алгоритмами, включая алгоритм Джая (JAYA) и оптимизацию роя частиц (PSO), показало более высокую точность ИНС-Е JAYA. Эта статья направлена на устранение пробела в знаниях путем прогнозирования механических характеристик текстильных полимерных композитных материалов (ТПКМ) на основе набора данных, включающего механические свойства тканей и пряжи в продольном и поперечном направлениях, которые составляют эти ткани. Через этот анализ исследование углубляется в методы оптимизации, направленные на тонкую настройку гиперпараметров и выбор соответствующих архитектур для моделей машинного обучения (МО). Основное внимание уделяется изучению эффективности методов оптимизации, таких как MOPSO [17] (многокритериальная оптимизация роя частиц), NSGA-II [18] (недоминирующий сортировочный генетический алгоритм II) и SPEA2 [19] (алгоритм эволюции Парето 2) в оптимизации моделей МО, таких как метод опорных векторов [20] (МОВ) и искусственные нейронные сети (ИНС), с целью максимизации точности и минимизации времени вывода.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для оценки прочностных, сжимающих и других свойств ТПКМ были подготовлены специально разработанные образцы в виде полосок размером 10x20 см. Эти образцы были надежно закреплены в универсальной испытательной машине QUASAR 50 (Galdabini, Cardano al Campo, Италия), которая прикладывает механические усилия к материалу.

Во время испытания на растяжение образец подвергался постепенно увеличивающейся осевой силе до разрыва, что позволяло оценить его прочность на растяжение и удлинение. Напротив, при испытании на сжатие образец сжимался вдоль своей длины путем приложения противоположных сил на его концах, что позволило характеризовать его прочность на сжатие и модуль упругости.

На рис. 1 показаны гистограммы, изображающие распределение физических характеристик текстильных ПКМ, демонстрирующих ключевые физические свойства, такие как прочность на растяжение, сжатие, изгиб, процент удлинения и модуль упругости при растяжении вдоль направлений основы и утка для каждой из указанных характеристик.

На рис. 2 показаны гистограммы, представляющие распределение физических характеристик, таких как межслойный модуль сдвига, коэффициент линейного термического расширения вдоль направления основы и плотность.

В исследовании было проведено всего 420 измерений на образцах для исследования 11 упомянутых физических характеристик различных типов ТПКМ и их соответствующих составляющих.

Для дальнейшего решения поставленной задачи необходимо определить выбранные методы оптимизации. NSGA-II используется для многокритериальных задач оптимизации, стремясь найти набор оптимальных решений, известных как множество Парето [21]. NSGA-II предназначен для задач с множеством критериев оптимизации, обеспечивая разнообразие в популяции, чтобы предотвратить преждевременную сходимость и достичь равномерного покрытия множества Парето.

SPEA-2 – это эволюционный алгоритм, также используемый для многокритериальной оптимизации. Он ранжирует решения на основе их силы и расстояния от других решений для эффективного выбора лучших решений для построения множества Парето [22].

MOPSO – это вариант метода оптимизации роя частиц (PSO), также применяемый для многокритериальной оптимизации. Он итеративно обновляет положение и скорость частиц в пространстве параметров [23] на основе лучших решений и обмена информацией между частицами.

Для реализации алгоритма был выбран Python из-за его мощных возможностей в области машинного обучения и оптимизации. Мы использовали библиотеку scikit-learn для работы с моделью МОВ и Pygmo для алгоритма MOPSO. Предобработка данных проводилась с использованием pandas и numpy, после чего данные разделялись на обучающие и тестовые наборы. Пространство оптимизации включало линейные, полиномиальные или RBF [24] типы ядер и параметр регуляризации для МОВ. Для многокритериальной оптимизации мы определили минимизацию времени вывода и максимизацию точности модели как цели. Время вывода рассчитывалось как среднее время вывода на тестовом наборе данных для каждой модели МОВ. Точность рассчитывалась как точность на тестовом наборе данных для каждой модели МОВ. Алгоритм MOPSO был реализован с использованием PyGMO [25], включающего инициализацию, обновление и оценку решений. Обновление решений следовало принципам доминирования и выбора лучших решений. Алгоритм продолжался до достижения указанного количества итераций или критериев остановки, после чего лучшее решение выбиралось на основе многокритериальной оптимизации.

На рис. 3 показана схематическая диаграмма потенциальной архитектуры нейронной сети для прогнозирования физических свойств ТПКМ.

Входные признаки включают свойства как ткани, так и нити. Свойства ткани включают такие параметры, как модуль упругости волокна при растяжении (ГПа), удлинение при разрыве (%), количество нитей (тыс. шт.), диаметр нити (мкм) и плотность (текс). Дополнительно, свойства нити включают прочность на растяжение вдоль основы и утка (Н и МПа), модуль Юнга при растяжении вдоль основы и утка (ГПа), предельное удлинение вдоль основы и утка (%), поверхностную плотность (г/м²) и толщину (мм). Категориальные признаки, такие как тип ТПКМ (например, Т-43-76, Атлас 5/3 или Атлас 8/3 и т.д.), узор плетения, технология формирования, соотношение связующего и армирующего, тип армирующего наполнителя, количество нитей основы/утка на 1 см, тип пряжи для основы и утка, и

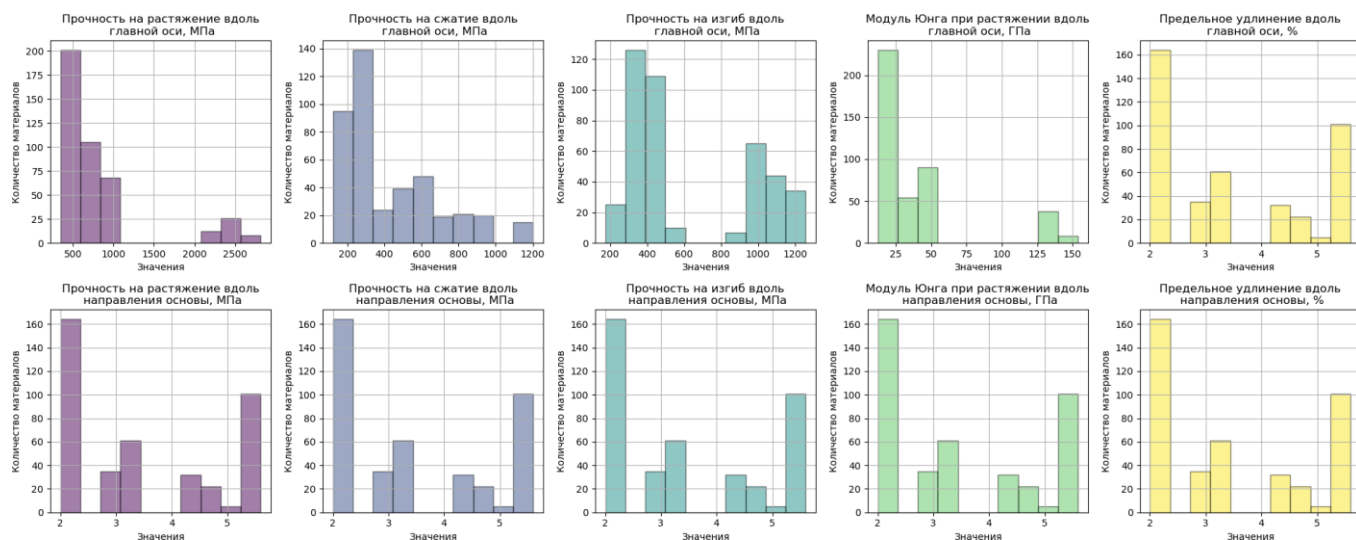


Рис. 1. Физические свойства текстильных ПКМ, такие как прочность на растяжение, сжатие, изгиб и модуль упругости при растяжении вдоль направлений основы и утка для рассматриваемых образцов



Рис. 2. Распределение межслойного модуля сдвига, коэффициента линейного термического расширения (КТР) вдоль направления основы и плотности для рассматриваемых образцов.

тип связующего, также включены в качестве входных данных. Сеть прогнозирует параметры конечного продукта ТПКМ, включая прочность на растяжение, прочность на сжатие, прочность на изгиб, модуль Юнга, межслойный модуль сдвига, предельное удлинение и КТР.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Данное исследование оценивает эффективность применения метаэвристических алгоритмов оптимизации, в частности MOPSO, SPEA2 и NSGA-II, для настройки гиперпараметров в ИНС и МОВ для предсказания физических свойств образцов ТПКМ на основе их изготовленных компонентов. На рисунке 4 представлены динамические кривые потерь для 5 лучших моделей для каждого случая оптимизации наряду с исследованием пространства параметров оптимизации.

Этот рисунок охватывает итерационный процесс оптимизации, иллюстрируя, как эти алгоритмы проходят через сложное пространство гиперпараметров для достижения оптимальной производительности в моделях ИНС и МОВ. Такой анализ предоставляет данные о сравнительной эф-

фективности этих методов оптимизации, освещая их пригодность для повышения прогностических возможностей моделей машинного обучения.

Архитектура модели ANN строится на основе представления индивидуумов генетического алгоритма (GA) [26] для оптимизаторов NSGA-II и SPEA2. Архитектура состоит из плотно связанных слоев с активационными функциями Leaky ReLU [27]. Количество слоев динамически определяется, но ограничено предварительно заданным максимумом. Количество нейронов в каждом слое ограничено определенными границами. Модель обучается с использованием кросс-валидации по k полям [28] для предотвращения переобучения, и ее производительность оценивается на основе метрики среднеквадратичной ошибки. Ключевые параметры, такие как размер популяции [29], указывают количество индивидуумов (архитектур ANN) в каждом поколении генетического алгоритма. В проводимых экспериментах размер популяции составляет 50. Вероятность кроссовера, определяющая вероятность скрещивания между двумя родительскими индивидуумами, равна

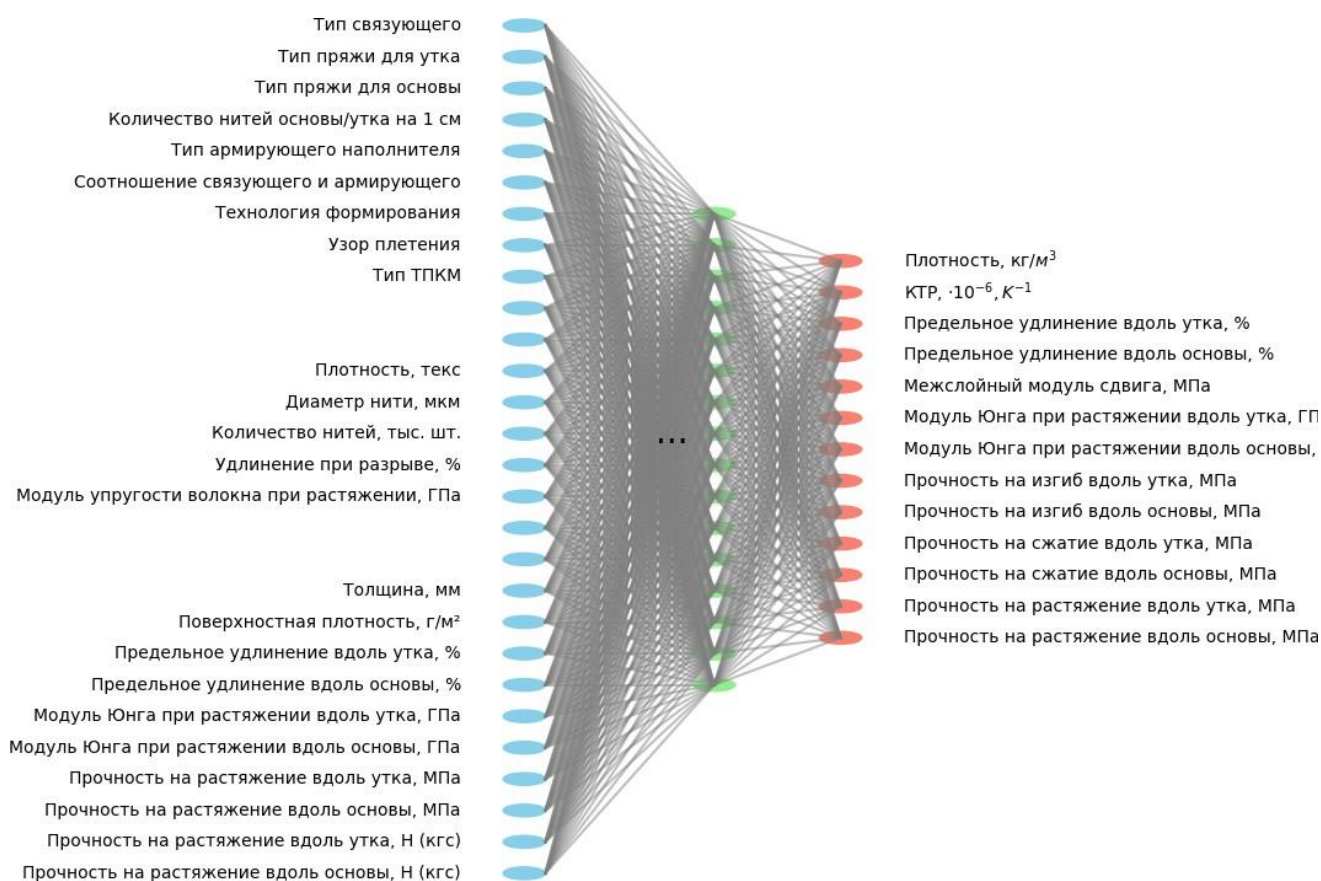


Рис. 3. Иллюстрация гипотетической архитектуры нейронной сети, предназначенной для прогнозирования физических характеристик ТПКМ

0.7. Значение вероятности мутации, представляющей собой вероятность внесения небольших случайных изменений в геномы индивидуумов, установлено 0.3. Число поколений указывает, сколько поколений пройдет GA для эволюции популяции. В проводимых экспериментах алгоритм работает 30 поколений. Количество эпох обучения [30] (итераций по всему набору данных) для обучения каждой модели ANN составляет 100 эпох. Минимальное количество нейронов в одном слое ANN установлено на 2, максимальное – на 32 с шагом 2. Мы также определяем минимальную и максимальную скорость обучения, равные соответственно 0,05 и 0,2, которые контролируют размер шага во время оптимизации градиентного спуска. Максимальное количество слоев в архитектуре ANN ограничено 5.

Для MOPSO функция приспособленности оценивает решение (позицию частицы), используя SVR и ANN, и вычисляет RMSE для каждой целевой переменной. Алгоритм выполняет MOPSO на указанное количество итераций (50) с 20 частицами, обновляя их позиции и скорости на основе их лучших личных и глобальных позиций.

ВЫВОДЫ

В заключение, наше исследование подчеркивает значительный потенциал методов машинного обучения и оптимизации в совершенствовании предсказательного моделирования свойств текстильных полимерных композитов (ТПК). Используя МОБ и ИНС как мощные инструменты

моделирования, мы успешно оптимизировали их гиперпараметры с помощью передовых алгоритмов оптимизации, включая MOPSO, NSGA-II и SPEA-2. Таким образом, мы продемонстрировали эффективность интеграции современных методов машинного обучения с методологиями оптимизации для повышения точности, надежности и применимости предсказательных моделей для свойств ТПК. Решая ключевые задачи и исследуя инновационные методологии, исследователи могут способствовать дальнейшему развитию материаловедения и инженерии, что в конечном итоге облегчает разработку высокопроизводительных текстильных полимерных композитов для различных применений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hsissou R. Polymer composite materials: A comprehensive review / R. Hsissou, R. Seghiri, Z. Benzekri, M. Hilali, M. Rafik, and Elharfi // Composite structures. – 2021. – Vol. 262, – 113640.
2. Fan J. An introduction to lightweight composite materials and their use in transport structures / J. Fan and J. Njuguna // in Lightweight Composite Structures in Transport. Elsevier, 2016, pp. 3–34.
3. Qian D. Fiber-reinforced polymer composite materials with high specific strength and excellent solid particle erosion resistance / D. Qian, L. Bao, M. Takatera, K. Kemmochi, and A. Yamanaka // Wear. – 2010. – Vol.268, no.3-4. – P. 637-642.

4. Dobrzanski L. Corrosion resistance of the polymer matrix hard magnetic composite materials nd– fe–b / L. Dobrzanski, M. Drak, J. Trzaska // *Journal of Materials Processing Technology*. – 2005. – Vol.164. – P. 795-804.
5. Krishnan M.R. An overview on nanosilica–polymer composites as high-performance functional materials in oil fields / M.R. Krishnan, H. Omar, A. Almohsin, E.H. Alsharaeh // *Polymer Bulletin*. – 2024. – Vol.81, no.5. – P. 3883-3933.
6. Hasan K.F. Sustainable bamboo fiber reinforced polymeric composites for structural applications: A mini review of recent advances and future prospects / K.F. Hasan, K.N. Al Hasan, T. Ahmed, S.-T. Gyorgy, M.N. Pervez, L. Bejo, B. Sandor, T. Alpar // *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*. – 2023. – 100362.
7. Low K.O. Influence of ball burnishing on surface quality and tribological characteristics of polymers under dry sliding conditions / K.O. Low, K. J. Wong // *Tribology International*. – 2011.
8. Feih S. Tensile strength modeling of glass fiber–polymer composites in fire / S. Feih, A. Mouritz, Z. Mathys, A. Gibson // *Journal of composite materials*. – 2007. – Vol.41, no.19. – P. 2387–2410.
9. Chang S.-M. Optimization of piezoelectric polymer composites and 3d printing parameters for flexible tactile sensors / S.-M. Chang, S. Hur, J. Park, D.-G. Lee, J. Shin, H. S. Kim, S. E. Song, J. M. Baik, M. Kim, H.-C. Song // *Additive Manufacturing*. – 2023. – Vol.67. – 103470.
10. Wen S.-M. Biomimetic gradient bouligand structure enhances impact resistance of ceramic- polymer composites / S.-M. Wen, S.-M. Chen, W. Gao, Z. Zheng, J.-Z. Bao, Cui, S. Liu, H.-L. Gao, S.-H. Yu // *Advanced Materials*. – 2023. – Vol.35, no.21. – 2211175.
11. He L. Substantial improvement of thermal conductivity and mechanical properties of polymer composites by incorporation of boron nitride nanosheets and modulation of thermal curing reaction / L. He, W. Zhang, X. Liu, L. Tong // *Polymer Composites*. – 2024. – Vol.45, no.3. – P. 2215-2231.
12. Wang Z. A roadmap review of thermally conductive polymer composites: critical factors, progress, and prospects / Z. Wang, Z. Wu, L. Weng, S. Ge, D. Jiang, M. Huang, M. Mulvihill, Q. Chen, Z. Guo, A. Jazzar // *Advanced Functional Materials*. – 2023. – Vol.33, no.36. – 2301549.
13. Fontes A. Data-driven failure prediction of fiber-reinforced polymer composite materials / A. Fontes, F. Shadmehri // *Engineering Applications of Artificial Intelligence*. – 2023. – Vol.120. – 105834.
14. Pimenta S. Recycling carbon fibre reinforced polymers for structural applications: Technology review and market outlook / S. Pimenta, S.T. Pinho // *Waste management*. – 2011. – Vol.31, no.2. – P. 378-392.
15. Fahem N. Prediction of resisting force and tensile load reduction in gfrp composite materials using artificial neural network-enhanced jaya algorithm / N. Fahem, I. Belaidi, A. O. Brahim, M. Noori, S. Khatir, M.A. Wahab // *Composite Structures*. – 2023. – Vol. 304. – 116326.
16. Zhang Y. Enhanced jaya algorithm: A simple but efficient optimization method for constrained engineering design problems / Y. Zhang, A. Chi, and S. Mirjalili // *Knowledge-Based Systems*. – 2021. – Vol.233. – 107555.
17. Borhanazad H. Optimization of micro-grid system using mopso / H. Borhanazad, S. Mekhilef, V. G. Ganapathy, M. Modiri- Delshad, and A. Mirtaheri // *Renewable energy*. – 2014. – Vol. 71. – P. 295-306.
18. Verma S. A comprehensive review on nsga-ii for multi-objective combinatorial optimization problems / S. Verma, M. Pant, V. Snasel // *IEEE Access*. – 2021. – Vol.9. – P. 57757-57791.
19. Liu X. An improved spea2 algorithm with local search for multi-objective investment decision-making / X. Liu and D. Zhang // *Applied Sciences*. – 2019. – Vol.9, no.8. – 1675.
20. Cervantes J. A comprehensive survey on support vector machine classification: Applications, challenges and trends / J. Cervantes, F. Garcia-Lamont, L. Rodríguez-Mazahua, A. Lopez // *Neurocomputing*. – 2020. – Vol.408. – P. 189-215.
21. Zouambi M. An alternative pareto-based approach to multi-objective neural architecture search / M. Zouambi, C. Dhaenens, J. Jacques // *Proc. 2023 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*. – 2023. – P. 1-8.
22. Mohanty R. Shear wave velocity- based liquefaction susceptibility of soil using extreme learning machine (elm) with strength pareto evolutionary algorithm (spea 2) / R. Mohanty, S.K. Das, M. Mohanty // *Earthquake Geotechnics: Select Proceedings of 7th ICORAGEE 2021*. – Springer, 2022. – P. 33-44.
23. Zhang X. A multi-objective optimization method for enclosed-space lighting design based on mopso / X. Zhang, J. Wang, Y. Zhou, H. Wang, N. Xie // *Building and Environment*, 2024.
24. Liu Y. Weighting factor design based on svr–mopso for finite set mpc operated power electronic converters / Y. Liu, Z. Yang, X. Liu, H. Dan, W. Xiong, T. Ling, M. Su // *Journal of Power Electronics*. – 2022. – Vol.22, no.7. – P. 1085-1099.
25. Tettelaar K. Towards multi-objective bayesian global optimization for space missions: master’s thesis // *Leiden Institute of Advanced Computer Science*, 2020. – URL: <https://theses.liacs.nl/>
26. Hassanat A. Choosing mutation and crossover ratios for genetic algorithms – a review with a new dynamic approach / A. Hassanat, K. Almohammadi, E. Alkafaween, E. Abunawas, Hammouri, V. S. Prasath // *Information*. – 2019. – Vol.10, no.12. – P. 390.
27. Xu J. Reluplex made more practical: Leaky relu / J. Xu, Z. Li, B. Du, M. Zhang, and J. Liu // *Proc. 2020 IEEE Symposium on Computers and communications (ISCC)*. – 2020. – P. 1-7.
28. Nti I.K. Performance of machine learning algorithms with different k values in k-fold cross-validation / I.K. Nti, O. Nyarko-Boateng, J. Aning // *International Journal of Information Technology and Computer Science*. – 2021. – Vol.13, no.6. – P. 61-71.
29. Abdul-Muneer P. Application of microsatellite markers in conservation genetics and fisheries management: recent advances in population structure analysis and conservation strategies // *Genetics research international*. – 2014. – Vol. 2014.
30. Manjula Devi R. Fast linear adaptive skipping training algorithm for training artificial neural network / R. Manjula Devi, S. Kuppaswami, R. Suganthe // *Mathematical Problems in Engineering*. – 2013. – Vol. 2013.

Optimization of Neural Networks for Predicting Mechanical Properties of Textile Polymer Composite Materials

Malashin I.P.

Bauman Moscow State Technical University
Moscow, Russian Federation
ivan.p.malashin@gmail.com

Masich I.S.

Reshetnev Siberian State University
of Science and Technology
Krasnoyarsk, Russia Federation
is.masich@gmail.com

Abstract. This paper explores the application of multi-objective optimization methods, including MOPSO, NSGA II, and SPEA2, for optimizing the hyperparameters of artificial neural networks (ANN) and support vector machines (SVM) to predict the physical properties of textile polymer composite materials (TPCM). The optimization process utilizes data on the physical characteristics of the constituent fibers and fabrics used in the manufacture of these composites. Through the use of optimization algorithms, we aim to

improve the predictive accuracy of ANN and SVM models, facilitating the development and production of high-performance textile polymer composites. The effectiveness of the proposed approach is demonstrated through comparative analyses and validation experiments, highlighting its potential for optimizing complex material systems.

Keywords: multi-objective optimization, neural networks, textile polymer composites, physical properties prediction.

Библиографическое описание статьи

Малашин И.П. Оптимизация нейронных сетей для прогнозирования механических свойств текстильных полимерных композитных материалов / И.П. Малашин, И.С. Масич // Машиностроение: сетевой электронный научный журнал. – 2024. – Т.11, №4. – С. 3-8. DOI: 10.24892/RIJIE/20240401

Reference to article

Malashin I.P., Masich I.S. Optimization of neural networks for predicting mechanical properties of textile polymer composite materials, *Russian Internet Journal of Industrial Engineering*, 2024, vol.11, no.4, pp. 3-8. DOI: 10.24892/RIJIE/20240401