

О НЕЙРОННЫХ СЕТЯХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

ЛЯШЕНКО Т.В.

Одесская государственная академия строительства и архитектуры

Аннотация. Отмечаются особенности и принципиальные различия двух методологий компьютерного строительного материаловедения. В основе одной искусственные нейронные сети, в другой используются экспериментально-статистические модели.

Ключевые слова: искусственный интеллект, нейронная сеть, экспериментально-статистическая модель, компьютерное материаловедение, строительный композит.

Анотація. Відзначаються особливості та принципові відмінності двох методологій комп'ютерного будівельного матеріалознавства. В основі однієї – штучні нейронні мережі, в іншій використовуються експериментально-статистичні моделі.

Ключові слова: штучний інтелект, нейронна мережа, експериментально-статистична модель, комп'ютерне матеріалознавство, будівельний композит.

Abstract. The features of two methodologies of computational materials science and essential differences between them are noted. One of methodologies is based on artificial neural networks; the other uses experimental-statistical models.

Key words: artificial intelligence, neural network, experimental-statistical model, computational materials science, building composite.

Методология искусственных нейронных сетей (ИНС, ANN – Artificial neural network или просто НС, NN) возникла из исследований в области искусственного интеллекта. Они (как и роботизация) находятся в мейнстриме технологического развития. Каковы большие плюсы и большие минусы такого неизбежного развития [1], в условиях «Big Data» – вопросы цивилизационного масштаба. Цель данных заметок – обозначить различия в возможностях двух указанных в заголовке методологий компьютерного материаловедения. Речь не

идет об их сравнении. Они не сравнимы. Единственное, что весьма условно их связывает – кибернетическое происхождение, от пресловутого «черного ящика».

Нейронные сети остаются таковыми, по сути; усложнилась их «начинка», начиная от нейронов МакКаллока–Питтса и персептрона Розенблатта до других многослойных нейронных сетей [2-3].

Развитие же методологии экспериментально-статистического моделирования (В.А. Вознесенский, ЭСМ, *ESM*), еще до появления этого названия [4] и определения его содержания [5-6], было направлено на преодоление черноты «ящика». При ЭСМ он оказывается весьма посветлевшим и более прозрачным.

Принципиальные различия. При ЭС-моделировании в изучение исследуемой системы уже на входе должны быть заложены не просто данные, но **системное априорное знание** о происходящих процессах. На важнейшем этапе предпланирования **«активного»** эксперимента [4, 7-8] определяются **управляемые** входы – нормализованные факторы, уровни которых можно назначать. Назначать оптимальными для качества синтезируемых моделей, планируя эксперимент (ПЭ, *DOE – Design of Experiment*). Именно такие входы (активные данные) связываются наилучшим образом с выходами системы (откликами, критериями ее функционирования) ЭС-моделями, в структуру которых (в нутро «ящика») тоже должно быть заложено системное априорное знание.

На основе планируемого реального эксперимента исследователь получает комплекс моделей: и для прогноза, и для анализа, и для решения обратных задач [9] (в том числе оптимизационных) при проектировании и эксплуатации систем, и для извлечения свернутого в моделях **нового знания**, с помощью планируемых компьютерных экспериментов [10]. Структурированная ЭС-модель – основная форма обобщения данных в методологии рецептурно-технологических полей [10-11]. Для ЭСМ важны не модели как таковые, а задачи, которые можно с их помощью решить, в том числе в тандеме с фундаментальными и структурно-имитационными моделями [12].

ЭС-модели могут быть причастны и к системам искусственного интеллекта – в качестве поставщиков данных и знаний для экспертных систем (как показано на схемах включения ЭС-моделей в компьютерное строительное материаловедение [10, 12-13]).

В методологии ИНС входы – **«пассивные»** данные. Знание закладывается косвенным образом при выборе входов, поиске и отборе данных и их дескрипторов [2-3]. На выходе, как правило, конкретные локальные оценки – по сути, снова данные.

Историю применения ИНС в строительном материаловедении можно начать с часто цитируемой статьи [14] (*Wittmann F.H.*,

Martinola G.). Следует отметить всплеск публикаций в 90-е годы [15-16 и др.], затем спад и некоторый новый всплеск [17-25]. Статьи, посвященные разным материалам, иногда начинаются с напоминания о нейронном устройстве мозга, многие содержат достаточно длинное описание алгоритмов, редко информацию о входных данных [20].

В качестве результата предлагается примерно следующее: для контрольной выборки получена высокая корреляция прогнозируемых сетью оценок прочности с данными натурных испытаний; поэтому можно прогнозировать, не нужно проводить эксперимент. Стоит заметить, что для проверки этой высокой корреляции эксперимент все-таки нужен.

Представление нейросетей в виде «черного ящика», невозможность выявить содержательные нейросетевые зависимости, служит аргументом против их применения; в статье [3] отмечаются отдельные попытки анализа и интерпретации. В ряде работ указывается на трудности при построении нейронных моделей, на необходимость соответствия сложности сети характеру изучаемой системы, на источники ошибок, главный из которых – данные для обучения. В частности, *N.R. Buenfeld et al* [15] отмечают, что «... *NN is only as good as the data on which it is trained*». Там же констатируется названная выше концептуальная основа этой методологии: «*The NN approach requires knowledge of the variables that may be important, but does not require prior understanding of the relationships between each variable and the output of interest...*».

ИНС, возможно, могут оказаться перспективными для автоматизированных и интеллектуализированных производств продуктов определенной номенклатуры. В условиях стремительного развития информационных технологий можно ожидать «прорывов» и в методологии ИНС; уже сейчас существует разнообразие подходов к их построению и обучению [3, 21-22]. Представляется возможным тандем ИНС и ЭСМ на тех или иных этапах исследований и разработок.

В ряде публикаций сравнивают результаты, полученные с помощью нейросети и множественной линейной регрессии, иногда отмечая, что во втором случае больше ошибка прогноза. Но это можно предположить априори для рассматриваемых в этих статьях объектов – для них регрессия должна быть нелинейной. Кроме того, трудно ожидать очень хороших предсказаний от «пассивных» данных, на которых построено регрессионное уравнение.

Что предлагает ЭСМ. Многолетний опыт применения ЭСМ в исследованиях и при проектировании широкого разнообразия композиционных материалов позволяет рекомендовать этот мощный инструмент [26] для разработок многокомпонентных строительных

композитов. ЭС-модели целесообразно использовать в исследованиях (на нано-, микро-, мезо-, макроуровне), разрабатывая **любые высокофункциональные материалы**, включая:

- неорганические и органо-минеральные вяжущие, полимерные связующие, многокомпонентные вяжущие системы с добавками молотого шлака, золы уноса, щелочных ингредиентов, с другими минеральными и химическими добавками;

- пасты и растворы на разных матрицах, в частности, ремонтные, защитные и отделочные композиции специального назначения, стойкие к жаре, морозу, динамическим нагрузкам и разным средам;

- сухие строительные смеси разного назначения;

- фиброармированные композиции;

- высокофункциональные бетоны, в том числе, легкие и ячеистые.

Для получения ЭС-моделей следует выбрать и реализовать оптимальный план эксперимента, с рациональным числом высококачественных испытаний. Построенные на результатах такого натурного эксперимента модели могут симулировать свойства материала в вычислительных экспериментах, позволяя:

- ♦ оценить и проанализировать отношения между составом, параметрами технологических процессов, структурными характеристиками, технологическими и эксплуатационными свойствами;

- ♦ найти компромиссно оптимальные рецептурно-технологические решения, обеспечивающие сбережение энергетических и других ресурсов, гарантирующие качество материала, отвечающие экологическим требованиям.

1. Anderson C. The end of theory: the data deluge makes the scientific method obsolete // Wired Magazine, 2008. wired.com/science/discoveries/magazine/16-07/pb_theory

2. Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С. Многослойные перцептроны в исследовании зависимостей "структура – свойство" для органических соединений. – Российский химический журнал, Т. 1, 2006, № 2. – С. 86-96.

3. Гальберштам Н.М., Баскин И.И., Палюлин В.А., Зефилов Н.С. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура – свойство органических соединений. – Успехи химии, Т. 72, 2003. – Вып. 7. – С. 706–727.

4. Современные методы оптимизации композиционных материалов / Под ред. В.А. Вознесенского. – К.: Будівельник, 1983. – 144 с.

5. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Experimental-statistical modeling in computational materials science // Proc. 3rd Int. Applied Statistics in Industry Conf., V. 1. – Wichita, KS (USA): ACG Press., 1995. – P. 287-298. frabul16.wix.com/dvoe

6. Voznesensky V., Lyashenko T. Experimental-statistical modelling in computational materials science. – Odessa, Astroprint, 1998. – 32 p.

7. Вознесенский В.А. Статистические методы планирования эксперимента в технико-экономических исследованиях. – 2-ое изд. – М.: Финансы и статистика, 1981.

8. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных

условий. – М.: Наука. – 2-е изд., 1976. – 279 с. **9.** Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В., Гаврилюк В.П. Некоторые обратные задачи компьютерного строительного материаловедения // Сучасні будівельні матеріали: Вісник Донб. НАБА, 2010-5(85). – Макеевка, 2010. – С. 33-38. **10.** Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. ЭС-модели в компьютерном строительном материаловедении. – Одесса: Астропринт, 2006. – 116 с. **11.** Composition-process fields methodology for design of composites structure and properties. Brittle Matrix Composites 11. – Insitute of Fundamental Technological Research PAS, 2015. – P.289-298. **12.** Ляшенко Т.В. О математических моделях в строительном материаловедении // Наука та будівництво №1, 2015. – С. 10-17. **13.** Вознесенский В.А. Компьютерное материаловедение, экспериментально-статистическое моделирование и оптимизация композиционных строительных материалов // Строительство в России: прогресс науки и техники. – М.: Инженерная академия РФ, 1993. – №1. – С. 98-101. **14.** Wittmann F.H., Martinola G. Optimisation of concrete properties by neural networks //Concrete 2000 – economic and durable construction through excellence: Proc. Int. Conf. – London: E & FN Spon, 1993. – P. 1889-1898. **15.** Kasperkiewicz J., Alterman D. Artificial intelligence in predicting properties of brittle matrix composites // Brittle Matrix Composites 6. – Cambridge: Woodhead Publ. Ltd., Warsaw: ZTUREK RSI, 1994. – P. 485-496. **16.** Buenfeld N.R., Hassanein N.M., Glass G.K. Neural networks for modelling the influence of cement chemistry on concrete durability // Proc. 10th Int. Congress on Chemistry of Cement, Gothenburg, 1997. – V.4. – 4iv070, 8 pp. **17.** Topçu I.B., Saridemir M. Prediction of compressive strength of concrete containing fly ash using artificial neural networks and fuzzy logic. – Computational Materials Science, V. 41, No. 3, 2008. – P. 255-430. **18.** Topçu I.B., Saridemir M. Prediction of mechanical properties of recycled aggregate concretes containing silica fume using artificial neural networks and fuzzy logic. – Computational Materials Science, V. 42, No. 1, 2008. – P. 74-82. **19.** Erdik T. Discussions on papers [17-18]. – Computational Materials Science, V. 44, No. 3, 2009. – P. 1022-1024. **20.** Gupta S. Using Artificial Neural Network to Predict the Compressive Strength of Concrete containing Nano-silica. Civil Engineering and Architecture 1(3), 2013. – P. 96-102. **21.** Lee N.K., Sourì H., Lee H.K. Neural network application overview in prediction of properties of cement-based mortar and concrete. i-asem.org/publication_conf/acem14/6.ACC/M4F.8.CC406_1160F.pdf **22.** Odejobi O.A, Umoru L.E. Applications of soft computing techniques in materials engineering: A review. – African Journal of Mathematics and Computer Science Research, V. 2(7), 2009. – P. 104-131. **23.** Subası S. Prediction of mechanical properties of cement containing class C fly ash by using artificial neural network and regression technique. – Scientific Research and Essay, V. 4 (4), 2009. – P. 289-297. **24.** Basyigit C. , Akkurt I., Kilincarslan S., Beycioglu A. Prediction of compressive strength of heavyweight concrete by ANN and FL models. – Neural Computing and Applications, V. 19, N 4, 2010. – P. 507-513. **25.** Dantas A.T.A., Leite M.B., Nagahama K.J. Prediction of compressive strength of concrete containing construction and demolition waste using artificial neural networks. – Construction and Building Materials, 38, 2013. – P. 717-722. **26.** Ляшенко Т.В. Об истории экспериментально-статистического моделирования // Моделирование и оптимизация композитов. Мат-лы междунар. семинара МОК. – Одесса: Астропринт, 2014. – С. 50-55. frabul16.wix.com/dvoe/Voznesensky