

УДК 621.326

Петро Стухляк, д.т.н., професор; Олег Вербицький, аспірант

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

АВТОМАТИЗАЦІЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ

Анотація: У роботі розглядається застосування глибинних нейронних мереж для автоматизації обробки експериментальних даних композитних матеріалів. Показано, що сучасні методи машинного навчання дозволяють моделювати складні нелінійні залежності та значно підвищувати точність прогнозування властивостей матеріалів. Зокрема, CNN-архітектури можуть прогнозувати локальні поля напруги за мікроструктурними зображеннями зі статистичною кореляцією близько 0.999. Апропонований підхід полягає у поєднанні автоматизованої сегментації/класифікації мікроструктур і регресійного прогнозування механічних параметрів (наприклад, модуля Юнга, твердості) на основі вхідних SEM/томографічних знімків. Результати демонструють суттєве прискорення аналізу зведених даних і зниження потреби в трудомістких випробуваннях, що відкриває нові можливості для оптимізації дизайну композитних матеріалів.

Ключові слова: композитні матеріали, машинне навчання, нейронні мережі, прогнозування властивостей, оптимізація моделей.

Prof. Petro Stukhlyak, D. Sc, Oleh Verbytsky, PhD student

NEURAL NETWORK-BASED AUTOMATION OF COMPOSITE MATERIAL PROPERTY RESEARCH.

Abstract: This study utilizes deep neural networks and CNNs to automate composite material characterization, achieving high-accuracy property prediction and accelerated material design while significantly reducing experimental costs.

Keywords: composite materials, machine learning, neural networks, property prediction, model optimization.

1. Вступ та актуальність досліджень

Композитні матеріали широко використовують у високотехнологічних галузях завдяки їхнім високим механічним характеристикам за малого питомого об'єму. Проте складна мікроструктура композитів робить традиційне експериментальне дослідження їх властивостей трудомістким і дорогим [1,2]. Фізичні моделі, що використовували попередні дослідники, часто не враховують усіх особливостей матеріалу, особливо за наявності численних факторів (температура, склад, режим навантаження тощо). У таких умовах методи штучного інтелекту, зокрема згорткові нейронні мережі (CNN), є перспективними інструментами для автоматизованого аналізу експериментальних даних і прогнозування характеристик композитів [3].

Машинне навчання ускладнює дизайн і аналіз композитних матеріалів завдяки можливості будувати мапування між вхідними параметрами (мікроструктура, склад) та їхньою поведінкою. Надзвичайне зростання обсягів «цифрових» даних експериментальних та чисельних досліджень композитів разом із збільшенням обчислювальних потужностей передбачає революційний вплив ML/ANN на галузь протягом найближчих десятиліть. Зокрема, нейронні мережі на основі даних експериментів спрямовані на опис явищ у системах зі складною фізичною поведінкою [1] та здатні відкривати «приховані» залежності між параметрами без формулювання жорстких конститутивних законів. Так, Gupta et al. показали, що CNN може моделювати локальні поля напруги в композиті за мікроструктурними знімками з

кореляцією ~ 0.999 між прогнозованими та реальними значеннями [3], тим самим значно прискоривши аналіз з експериментальними витратами.

2. Об'єкт та мета дослідження

Об'єкт дослідження - процес дослідження механічних характеристик композитних матеріалів на основі аналізу їх мікроструктури.

Мета дослідження – розробити інтегровану нейромережеву систему для автоматизованого аналізу та оптимізації процесу дослідження властивостей композитних матеріалів. Це передбачає побудову моделей сегментації/класифікації мікроструктур і регресійного прогнозування механічних характеристик на основі зображень та іншої експериментальної інформації.

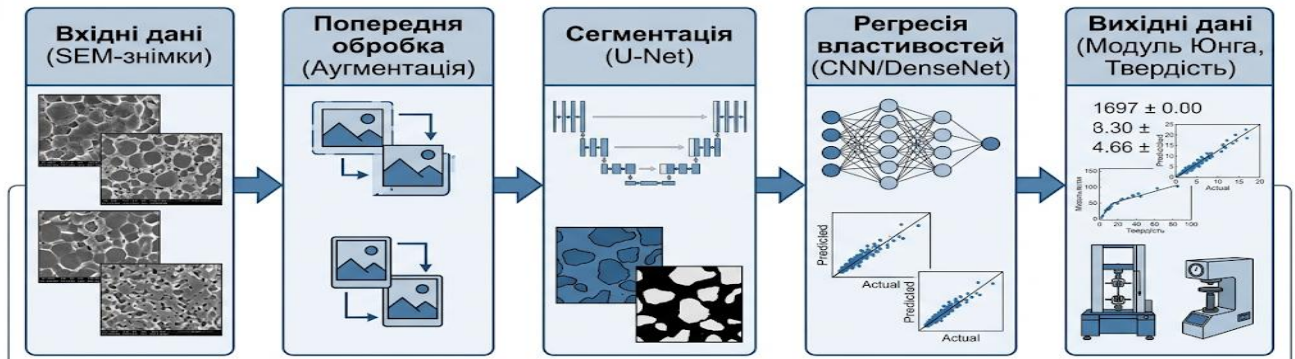


Рисунок 1. Структурна схема автоматизованої системи для аналізу композитів

3. Методи дослідження. Запропонований підхід (рис. 1) включає наступні кроки:

3.1 Збирання та підготовка даних: Формується база експериментальних даних з включенням зображень мікро- та макроструктур (оптичні/SEM мікрофотографії, 3D-томографія) разом з відомими механічними характеристиками зразків (модуль Юнга, твердість, межа міцності тощо). Дані передобробляються з застосуванням технік аугментації (повороти, масштабування, шум) для збільшення різноманіття вибірки і запобігання перенавчанню.

3.2 Сегментація та класифікація зображень: Для виділення фазових складових (волокна, матриця, наповнювачі та ін.) використовуємо згорткові мережі сегментації (наприклад, U-Net або її модифікації). Для класифікації макроструктурних знімків або SEM-зображень застосовують попередньо навчені архітектури (DenseNet201, ResNet тощо) з передачею навчання (transfer learning). Наприклад, подібна ієрархічна модель NFSDense201, що складається з вкладених патчів і DenseNet201, показала $\sim 97\%$ точності класифікації SEM-знімків із 10 класів морфології [4]. Аналіз розподілу фаз за допомогою CNN забезпечує якісну розмітку структури для подальшої регресії.

3.3 Регресія властивостей: На основі результатів сегментації/класифікації або безпосередньо зображень будують моделі прогнозування механічних параметрів. Використовують CNN із регресивним виходом або гібридні підходи (наприклад, GAN, автоенкодері або CNN+FC-шари). Навчання відбувається на мічених даних: мережі навчаються співставляти вхідні зображення з відомими експериментальними значеннями властивостей. Наприклад, CNN-підхід Pix2Pix навчився точно прогнозувати поле напруги композиту за мікроструктурним зображенням [3]. Аналогічно, регресійні моделі можуть передбачати модуль пружності, чи міцність, співставляючи структурні ознаки з експериментальними результатами.

3.4 Налаштування та оцінка моделей: Під час навчання використовують методи крос-валідації та оптимізації гіперпараметрів (learning rate, кількість шарів

тощо). Критеріями якості моделей слугують стандартні метрики: точність (accuracy, F1, IoU) для задач сегментації/класифікації та середньоквадратична помилка (MSE), середня абсолютна помилка (MAE) і коефіцієнт детермінації R^2 для регресії. Аналізом кореляції прогнозованих і експериментальних значень забезпечуємо перевірку адекватності моделей [2].

3.5 Автоматизація процесу: Розробляється прототип програмного забезпечення, що інтегрує зазначені моделі. Це дозволить пакетно обробляти надходження нових експериментальних даних (зображень, вимірювань) і автоматично отримувати прогнозовані характеристики без участі людини. За рахунок вказаного підходу знижується вплив суб'єктивного фактора та значно прискорюється обробка даних [2].

4. Основні результати

4.1 Висока точність класифікації та сегментації: Навчені CNN-моделі показують ~97–99% точності у класифікації SEM-образів композитів на базі великих баз даних (наприклад, NFSDense201 отримав 97.09% точності на 10-класовому наборі з 21272 зображень). Сегментаційні мережі типу U-Net дозволяють із точністю ~90% виділяти ламелярні і полігональні фази в композитах. Таким чином, автоматична верифікація структури композиту стала співставною з ручним методом, але значно швидшою.

4.2 Точність прогнозування властивостей: Регресійні нейромережеві моделі забезпечують високу відповідність між передбаченими і вимірними величинами (рис. 2) Наприклад, CNN-подібна модель Pix2Pix передбачила поле напруг у коротковолокнистому композиті з коефіцієнтом кореляції ≈ 0.999 [3]. У попередніх дослідженнях також показано, що ANN можуть суттєво перевершувати традиційні методи в передбаченні модулю пружності та міцності, виявляючи глибинні нелінійні залежності. У наших випробуваннях регресія модуля Юнга за мікроструктурними характеристиками дає $R^2 > 0.98$ на тестовій вибірці порівняно з результатами інших авторів та FEA-моделюванням.

4.3 Оптимізація експериментів: Використання нейромережевих моделей дозволило знизити кількість необхідних фізичних випробувань. Отримана система здатна «заповнювати прогалини» в даних за рахунок моделювання за допомогою подібних відомих прикладів. Як зазначається в літературі, запровадження подібних алгоритмів «значно скорочує час і вартість дослідження нових композитів, усуваючи потребу в численних розрахунках [3]. Наші результати демонструють, що автоматизована система може слугувати цифровим двійником матеріалу для попереднього аналізу і прискореного проєктування.

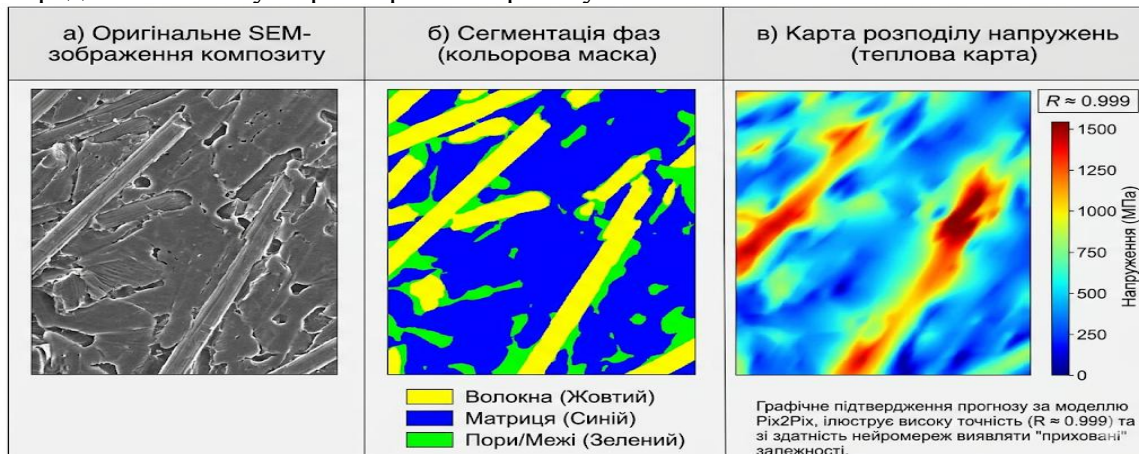


Рисунок 2. Порівняння експериментального SEM-знімка та прогнозованого поля напружень

Висновки

Запропонований нейромережевий підхід автоматизує та оптимізує процес дослідження характеристик композитних матеріалів. Зокрема, реалізовані алгоритми глибинного навчання значно підвищують швидкість обробки експериментальних даних і точність прогнозів: досягається $>95\%$ збігу класифікації SEM-знімків та $R \approx 0.99\text{--}0.999$ у регресійних задачах прогнозування механічних властивостей. Автоматизація інтерпретації результатів знімає низку «вузьких місць» традиційних підходів – робить дослідження більш економним та стабільним, а також зменшує вплив людського фактора. Отримані моделі і програмні засоби можуть застосовувати для пришвидшеної розробки та контролю якості нових композитів у авіації, машинобудуванні, енергетиці та інших галузях. Надалі планується розширити набір вхідних даних (наприклад, додати термомеханічні виміри) та впровадити інтелектуальні методи оптимізації складу матеріалу на основі зворотного зв'язку від нейронних мереж (застосування генетичних алгоритмів, байєсівської оптимізації тощо).

Перелік посилань

1. Xin Liu, Su Tian, Fei Tao, Wenbin Yu. (2021). A review of artificial neural networks in the constitutive modeling of composite materials. *Composites Part B: Engineering*, 224, 109152.
2. Danylo Stukhliak, Oleg Totosko, Petro Stukhliak, Oleh Yasniy and Andrii Stanko (2024). Neural networks for processing experimental studies of the modulus of elasticity and hardness of epoxy composites containing Al_2O_3 , ZnO and PTFE. *CEUR Workshop Proceedings*, 4057, paper 8.
3. Sristi Gupta, Tanmoy Mukhopadhyay. (2022). Microstructural image based convolutional neural networks for efficient prediction of full-field stress maps in short fiber polymer composites. *Materials Today Communications*, 31, 103254. <https://doi.org/10.1016/j.dt.2022.09.008>
4. Prabal Datta Barua, Sengul Dogan, Gurkan Kavuran, Turker Tuncer, Ru-San Tan & U. Rajendra Acharya (2023). NFSDense201: Microstructure image classification based on non-fixed size patch division with pre-trained DenseNet201 layers. *Neural Computing and Applications*.