

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА ЯВИЩ

УДК 681.5.13

DOI: <https://doi.org/10.30970/eli.12.7>

ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ВУГЛЕЦЕВИХ МАТЕРІАЛІВ З ВИКОРИСТАННЯМ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ

Р. Лісовський¹, І. Поплавський¹, Б. Рачій¹, З Любунь²

¹*Прикарпатський національний Університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, 76018, Івано-Франківськ, Україна
bogdan_rachiy@ukr.net*

²*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Ген. Тарнавського, 107, 79017 Львів, Україна
zinovijlyubun@gmail.com*

В роботі розглянуто можливість використання багаточарових нейронних мереж для прогнозування властивостей нанопористих вуглецевих матеріалів

Ключові слова: нанопористі матеріали, багаточарові нейромережі, прогнозування властивостей матеріалів.

Вступ.

Нанопористі вуглецеві матеріали (НВМ) завдяки великій питомій площі поверхні та унікальним фізико-хімічним властивостям знаходять широке застосування у різноманітних сферах науки та виробництва, зокрема, в якості каталітичних, електрохімічних та сорбційних матеріалів.

Широко розвинена пориста структура, велика питома поверхня, достатня хімічна інертність дозволяють вуглецевим матеріалам знайти застосування у очищенні питних та стічних вод від технологічних забруднень, ремедіації ґрунтів, в якості гемо- та ентеросорбентів [1, 2]. З урахуванням широкого застосування та незважаючи на глибину та довгу історію їх вивчення, вуглецеві матеріали є надзвичайно цікавим об'єктом досліджень, адже різноманіття вихідної сировини, методів активації та хімічної обробки поверхні достатньо велике. Тому встановлення оптимальних параметрів та умов проведення технологічних процесів хімічної активації та температурної обробки рослинної сировини з метою отримання пористих вуглецевих матеріалів з наперед заданими параметрами пористої структури є актуальним науковим і практичним завданням. Оптимізація методів отримання нанопористих вуглецевих матеріалів вимагає проведення великої кількості експериментальних досліджень що потребує значних матеріальних та часових затрат.

Тому створення математичної моделі залежності характеристик пористої структури НВМ від технологічних умов отримання є актуальною задачею. Створення такої моделі дасть можливість прогнозувати властивості НВМ в залежності від різноманітних

технологічних параметрів, що дасть змогу визначити напрямок пошуку оптимальних характеристик матеріалів.

Для прогнозування фізичних властивостей матеріалів необхідно побудувати математичну модель фізичного об'єкта з набором вхідних величин заданих вектором вхідних параметрів x , що визначають властивості матеріалу - вектор вихідних параметрів y .

Під математичною моделлю розуміють систему рівнянь (інтегральних, диференціальних чи алгебраїчних) які дають змогу по заданому вектору вхідних параметрів x розрахувати вектор вихідних параметрів y .

Складність фізичних процесів у досліджуваному матеріалі викликає значні труднощі у реалізації математичної моделі при допомозі математичних залежностей у вигляді системи рівнянь.

Використання неймереж дає можливість обійти цю проблему. Треба розуміти що саме обійти а не повністю вирішити. Береться неймережева структура і вважається що після навчання вона буде відігравати роль математичної моделі фізичного об'єкта яку надалі можна використати для прогнозування.

Для навчання неймережі потрібно мати навчаючі пари (x^i, y^i) (бажано якомога більшу кількість), де y^i – значення вихідного вектора y при заданому вхідному x^i .

Нейронні мережі вважаються універсальними апроксиматорами [3,5]. Здатність нейронних мереж до апроксимації багатовимірних функцій базуються на теорії Колмогорова [4]. На основі теореми Колмогорова можна вибрати структуру нейронної мережі мінімальної складності для апроксимації довільної функції багатьох змінних. Теорема Колмогорова відіграє важливу роль у теорії нейронних мереж. Вона дає математичне обґрунтування можливості реалізації довільної багатовимірної функції шляхом представлення цієї функції за допомогою більш простих функцій.

Найбільш універсальною і найчастіше вживаною нейронною структурою що використовується для вирішення задачі апроксимації є багатошаровий перцептрон структура якого показана на рисунку 1.

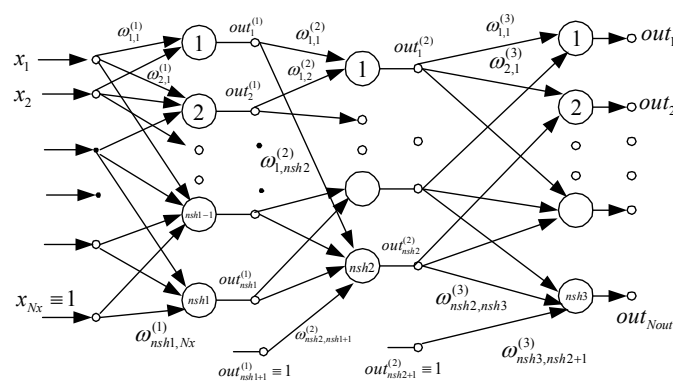


Рис.1. Структура багатошарової нейронної мережі.

Згідно з теоремою Колмогорова для апроксимації довільної функції достатньо

одного прихованого шару з кількістю нейронів $2N+1$, де N - розмірність функції [4]. Розрахунок кількості шарів згідно теореми Колмогорова носить теоретичний характер. Для практичних задач кількість нейронів прихованого шару коливається від N до $3N$ а кількість прихованих шарів до двох [3].

Використання нейромереж для прогнозування результатів вимірювання фізичних експериментів має свої особливості і вимагає попереднього опрацювання вхідних даних. Попереднє опрацювання передбачає, за необхідності, видалення шумових складових та нормування даних – зведення до заданих границь, зазвичай в межах $[0..1]$. Нормування даних пришвидшує процес навчання нейромереж та необхідне при використанні функції активації котрі мають стискаючі властивості. Наприклад, для сигмоїдальної функції активації значення на виході нейрона може змінюватися лише в діапазоні $[0..1]$.

При використанні нейромережі для прогнозування необхідно врахувати що прогнозовані значення на виході мережі не можуть перевершувати одиницю.

Таблиця 1.

Характеристики пористої структури НВМ

Зразок	Питома поверхня		
	$S_{\text{ВЕТ}}$, м ² /г	$S_{\text{месо}}$, м ² /г	$S_{\text{мікро}}$, м ² /г
ВК-025-450	767	41	726
ВК-025-500	948	95	853
ВК-025-550	754	48	706
ВК-050-450	1519	275	1244
ВК-050-500	1219	138	1081
ВК-050-550	1270	181	1089
ВК-075-450	1825	530	1295
ВК-075-500	1668	565	1103
ВК-075-550	1990	595	1395
ВК-100-450	1818	664	1154
ВК-100-500	1754	744	1010
ВК-100-550	1972	1029	943
ВК-125-450	1192	559	633
ВК-125-500	1192	769	423
ВК-125-550	1415	1023	392
ВК-150-450	1118	567	551
ВК-150-500	1154	719	435
ВК-150-550	1061	729	332
ВК-175-450	856	399	457
ВК-175-500	1099	809	290
ВК-175-550	1275	923	352
ВК-200-450	1187	780	407
ВК-200-500	1173	905	268
ВК-200-550	1216	952	264

Для нормування вхідних і вихідних векторів нейромережі можна використати залежність:

$$x_i'' = (x_i - x_{\min})(b - a) / (x_{\max} - x_{\min}) + a,$$

де x_i - ненормовані дані, x_{\max}, x_{\min} - максимальне та мінімальне значення з масиву вхідних даних, a, b - нижня і верхня межа нормованих даних відповідно.

Зворотна операція для повернення до реальних фізичних параметрів проводиться за формулою:

$$x_i = (x_i'' - a)(x_{\max} - x_{\min}) / (b - a) + x_{\min}.$$

Для навчання нейронної мережі використовувались характеристики пористої структури НВМ ($S_{\text{ВЕТ}}$ – загальна площа поверхні, S_{meso} – площа мезопор) отримані на основі аналізу ізотерм адсорбції/десорбції азоту при температурі його кипіння (-196°C) [6]. Ці дані приведені в табл. 1.

Серію зразків (табл. 1) позначено відповідно до відношення маси кислоти до маси вихідної сировини та температури активації. Наприклад, ВК-150-450 – матеріал, отриманий в результаті змішування кислоти у співвідношенні 1:1,5 з вихідною сировиною та активований при температурі 450°C .

Для апроксимації цих залежностей був використаний трьохшаровий перцептрон із сигмоїдальною функцією активації. Навчена мережа була використана для прогнозування значень $S_{\text{ВЕТ}}$ та S_{meso} в залежності від відношення кислоти та вихідного матеріалу та температури активації як всередині інтервалу вхідних параметрів так і за їх межами.

На рис. 2 показано залежність $S_{\text{ВЕТ}}$ від відношення кислоти та вихідного матеріалу та температури активації на основі експериментальних даних з таблиці 1.

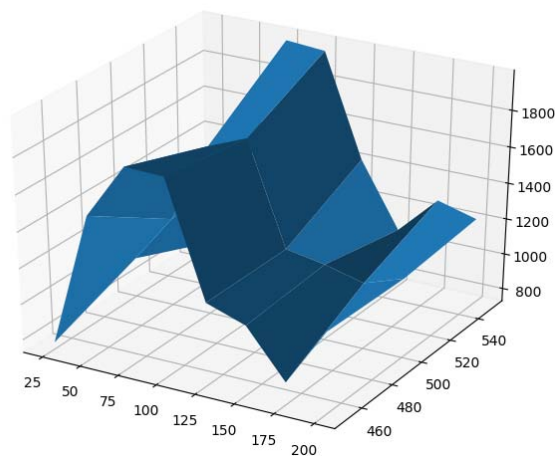


Рис.2. Залежність загальної площі поверхні від відношення кислоти та вихідного матеріалу.

Використовуючи тришарову нейронну мережу з структурою 18-6-1, де вхідний шар містить 18 нейронів, прихований 6, а вихідний один нейрон отримаємо залежність загальної площі поверхні від відношення кислоти та вихідного матеріалу та температури активації в розширеному діапазоні вхідних параметрів. Результати апроксимації

показані на рис. 3. На основі отриманої апроксимації можна визначити значення загальної площі поверхні як всередині діапазону вимірювань так і поза його межами.

На рис. 3 показано залежність S_{meso} від відношення кислоти та вихідного матеріалу та температури активації на основі експериментальних даних з табл. 1.

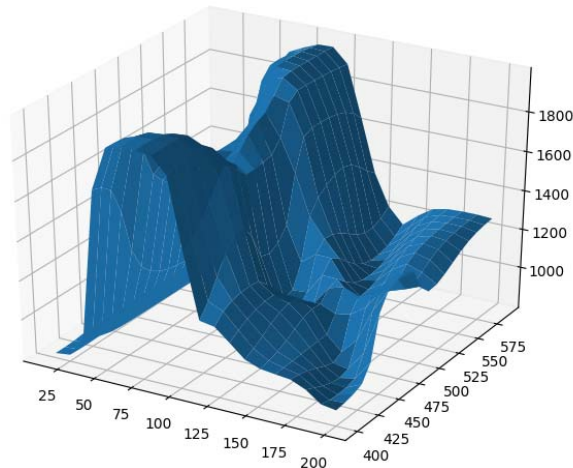


Рис.3. Прогнозована залежність загальної площі поверхні мезопор від відношення кислоти та вихідного матеріалу в розширеному діапазоні вхідних параметрів.

На рис. 4 показані результати апроксимації котрі можна використати для прогнозування значення S_{meso} в середині інтервалу експериментальних досліджень.

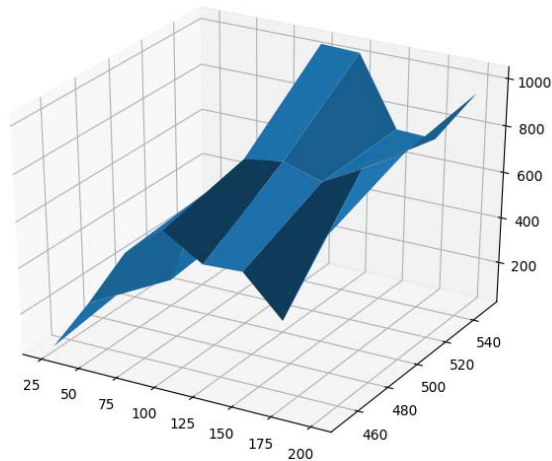


Рис.4. Залежність площі мезопор від відношення кислоти та вихідного матеріалу.

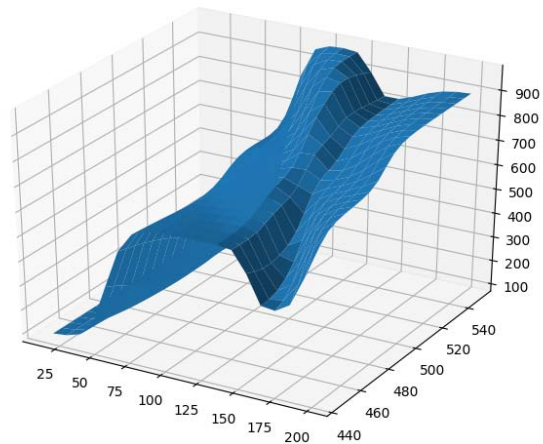


Рис.4. Прогнозована залежність площі мезопор від відношення кислоти та вихідного матеріалу в середині інтервалу експериментальних даних.

На рис. 5 показано як отримана нейромережева модель використовується в розширеній області вихідних параметрів поза межами проведених експериментів.

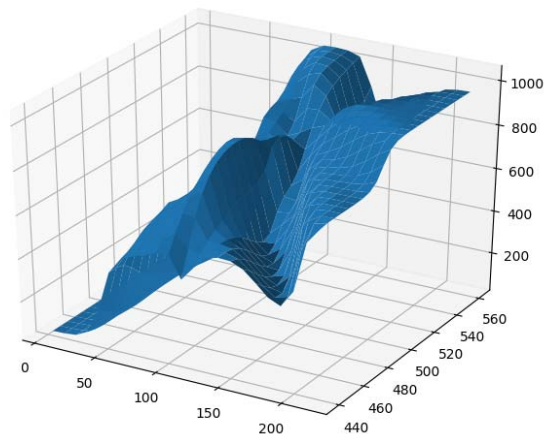


Рис.5. Прогнозована залежність площі мезопор від відношення кислоти та вихідного матеріалу поза межами інтервалу експериментальних даних.

Окрім того, нейромережева модель дає змогу визначити оптимальні вхідні параметри, наприклад, максимальне значення $S_{\text{meso}}=1035 \text{ м}^2/\text{г}$ можна очікувати отримати при відношенні кислоти та вихідного матеріалу 122 та температурі активації 527 °С.

Таким чином, на основі числових експериментів можна стверджувати, що багат шарова нейронна мережа може бути використана для прогнозування фізичних властивостей нанопористих вуглецевих матеріалів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Shvets R.Ya.* New Nanoporous Biocarbons with Iron and Silicon Impurities: Synthesis, Properties, and Application to Supercapacitors / R.Ya.Shvets, I.I. Grygorchak, A.K. Borisyuk, S.G. Shvachko, A.I. Kondyr, V.I. Baluk, A.S. Kurepa, and B.I. Rachiy // *Physics of the Solid State*. – 2014. – Vol. 56, No.10. – P. 2021–2027.
2. *Rachiy B. I.* A composite of nanoporous carbon and thermally exfoliated graphite as an effective electrode material for supercapacitors / B. I. Rachiy, I. M. Budzulya, E. A. Ivanenko, S. L. Revo // <http://link.springer.com/journal/11987> *Surface engineering and applied electrochemistry*. – 2015. – Vol. 51, № 5. – P. 501–508.
3. *Осовский С.* Нейронные сети для обработки информации/ Пер. с польского И. Д. Руданского. М.: Финансы и Статистика, 2002. – 344 с.
4. *Колмогоров А.Н.* О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиции непрерывных функций одного переменного // Докл. АН СССР. 1957. Т. 114, №5. – С. 953-956.
5. *Funahashi K.* On the Approximate Realization of Continuous Mappings by Neural Networks // *Neural Networks*, 1989.–V.2, № 3.– P183-192.
6. *Rachiy B.I.* Specific energy characteristics of nanoporous carbon activated by orthophosphoric acid / B.I. Rachiy, B.K. Ostafiychuk, I.M. Budzulyak, N.Ya. Ivanichok // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. – 2015. – V. 7, № 4. – P. 40077(6).

FORECASTING PROPERTIES OF CARBON MATERIALS WITH THE USE OF NEURAL NETWORKS**R. Lisovskyi¹, I. Poplavskyi¹, B. Rachii¹, Z. Liubun²**

¹*Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
Shevchenko Street, 57, Ivano-Frankivsk, Ukraine, 76018
bogdan_rachiy@ukr.net*

²*Ivan Franko National University of Lviv,
107 Tarnavskogo St., Lviv, Ukraine, 79017
zinovijlyubun@gmail.com*

Nanoporous carbon materials (NCM) due to the large specific surface area and unique physical and chemical properties are widely used in various branches of science and production as catalytic, electrochemical and sorption materials.

Taking into account the widespread application and despite the deep and long history of their study carbon materials are very interesting research object, because of the quite large variety of raw materials, activation methods and chemical treatment of the surface. That's why defining of optimal parameters and conditions of technological processes of chemical activation and temperature treatment of plant raw materials for porous carbon materials obtaining with predetermined parameters of the porous structure is an urgent scientific and practical task. Optimization of the methods for nanoporous carbon materials obtaining requires a large number of experiments that require significant material and time costs. Therefore, the development of a

mathematical model for the dependence of the characteristic of NCM porous structure on the technological conditions of obtaining is an urgent task.

The difficulty of physical processes in the investigated material causes significant difficulties in implementing a mathematical model with the help of mathematical dependencies in the form of a system of equations. Using the neural networks gives the possibility to avoid this problem.

The neural network structure is taken and it is considered that after training it will play the role of a mathematical model of a physical object which then can be used for prediction. The created neural network plays the role of an approximator, which makes it possible to determine the properties of the physical system at arbitrary values.

The ability of neural networks to approximate multidimensional functions is based on Kolmogorov's theory.

According to Kolmogorov's theorem the only one hidden with the number of neurons $2N+1$, where N dimension of function is sufficient for approximation of an arbitrary function.

Numerical experiments have shown that a multilayered neural network can be used to predict the physical properties of nanoporous carbon materials.

Keywords: nanoporous materials, multilayered neural networks, prediction of material properties.

*Стаття: надійшла до редакції 10.09.2019,
доопрацьована 14.09.2019,
прийнята до друку 15.09.2019.*