

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ПОДХОДЫ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ НОВЫХ НИКЕЛЕВЫХ СТОМАТОЛОГИЧЕСКИХ СПЛАВОВ

А.А. Ганеев, Е.Ф. Шайхутдинова

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа, Россия

Одна из важнейших проблем стоматологии — производство высококачественных, надежных и недорогих зубных протезов на основе различных конструкционных материалов, из которых наиболее приемлемыми являются металлы и их сплавы.

На протяжении многих лет в зуботехнической практике применяются золотые сплавы. В тоже время в связи с высокой стоимостью благородных металлов, а также их недостаточной прочностью, твердостью и повышенной истираемостью в настоящее время ведется интенсивный поиск металлов и сплавов, способных заменить золото и другие благородные металлы. В частности значительные успехи были достигнуты при введении в ортопедическую стоматологию сплавов на никелевой основе, которые обладают достаточной прочностью и пластичностью в сочетании с хорошими технологическими свойствами.

Однако повышающиеся требования к материалу и конструкции протезов не позволяют использовать применяемые в настоящее время сплавы. Поэтому необходимы новые никелевые стоматологические сплавы (НСС) с более высокими физико-механическими и технологическими свойствами.

Процесс разработки и создания новых материалов на сегодняшний день является очень трудоемкой и дорогостоящей технологией. Сложный механизм легирования и многофазная структура НСС исключают возможность подбора точной математической зависимости между составом и свойствами, вследствие чего наиболее перспективные сплавы могут оказаться за пределами исследовательских возможностей. Методы искусственного интеллекта, в частности искусственных нейронных сетей (ИНС), позволяют достаточно быстро и с минимальными затратами не только оптимизировать химический состав сплавов, но и рассчитывать прогностические значения физико-механических свойств.

Способность ИНС после обучения к обобщению и пролонгации результатов создает потенциальные предпосылки для построения на их базе различного рода прогнозирующих систем. Как правило, нейронные сети используются тогда, когда неизвестен точный вид зависимости между входами и выходами, — если бы он был известен, то связь можно было бы моделиро-

вать непосредственно. Другая существенная особенность нейронных сетей состоит в том, что зависимость между входом и выходом находится в процессе обучения сети. Следовательно, задачу прогнозирования свойств НСС с математической точки зрения можно рассматривать как задачу экстраполяции, в терминах ИНС — это задача настройки параметров и обучения сети обработке многомерной информации, характеризующейся нелинейной зависимостью свойств от химического состава сплава.

Формализованная постановка задачи выглядит следующим образом:

Исходные данные представляют собой сведения о химическом составе НСС, т.е. наблюдения $(X_1, X_2, \dots, X_m)$, где $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$, n — число рассматриваемых характеристик свойств, т.е. компонентов сплава. Каждому из X_i соответствует значение целевой функции — свойство $(Y_1, Y_2, \dots, Y_m)$. Каждый объект (НСС) описывается набором факторов (концентраций легирующих элементов (ЛЭ)). Массив исходных данных представляется в виде матрицы $(m \cdot n)$, где m — число объектов-сплавов, n — число признаков-компонентов, характеризующих значения концентраций химических элементов, составляющих сплав, сумма которых (по строкам) составляет 100%:

$$X_{ij} = \begin{bmatrix} x_{11} & \dots & x_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ x_{m1} & \dots & x_{mn} \end{bmatrix}$$

ГОСТ Р 51767-2001 установлен обязательный контроль предела текучести, твердости и относительного удлинения НСС, из которых наиболее значимым (определяющим) свойством является предел текучести. Поэтому целевой функцией в предлагаемом исследовании является предел текучести.

Однослойные ИНС не отвечают требованиям прогнозирования НСС, т.к. стоматологические сплавы обладают многофазной структурой и достаточно сложным механизмом легирования. Поэтому для решения задачи проектирования НСС более приемлемыми являются многослойные ИНС.

В многослойных ИНС, в которых связи между собой имеют только соседние слои, каждый нейрон предыдущего слоя связан со всеми ней-

ронами последующего слоя, а нейроны имеют активационную функцию, например сигмоидальную, для которой существует простой аналитический способ определения производной. Наиболее распространенным и эффективным способом обучения считается способ обратного распространения с многочисленными усовершенствованиями, например, методом градиентного спуска или методом модифицированный ParTan.

Алгоритм обратного распространения состоит в следующем:

Шаг 0. Задать начальные значения весов всех нейронов всех слоев $V(t=0)$ и $W(t=0)$ случайными числами.

Шаг 1. Сети предъявляется входной образ X_a , в результате формируется выходной образ $y \neq Y_a$. При этом нейроны последовательно от слоя к слою функционируют по следующим формулам:

$$\text{скрытый слой} \quad x_j = \sum_i W_{ij} X_i^\alpha; \quad y = f(x_j),$$

$$\text{выходной слой} \quad x_k = \sum_j V_{jk} y_j; \quad y_k = f(x_k),$$

где $f(x)$ - сигмоидальная функция.

Шаг 2. Минимизировать функционал квадратичной ошибки сети для данного входного образа:

$$E = \frac{1}{2} \sum_k (y_k - Y_k^\alpha)^2$$

градиентным методом оптимизации, получив при этом все необходимые величины для подстройки весов выходного слоя V .

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \text{Синдром}_{(ax_1)(1)} = \text{Сигмоида}_1(\beta_{(ax_1)(1)}^{(0)} + \beta_{(ax_1)(1)}^{(1)} x_1 + \beta_{(ax_1)(1)}^{(2)} x_2 + \dots + \beta_{(ax_1)(1)}^{(k)} x_k) \\ \dots \\ \text{Синдром}_{(ax_k)(n_1)} = \text{Сигмоида}_1(\beta_{(ax_k)(n_1)}^{(0)} + \beta_{(ax_k)(n_1)}^{(1)} x_1 + \beta_{(ax_k)(n_1)}^{(2)} x_2 + \dots + \beta_{(ax_k)(n_1)}^{(k)} x_k) \end{array} \right. \\ \text{Синдром}_{11} = \text{Сигмоида}_2(\beta_{11}^{(0)} + \beta_{11}^{(1)} \cdot \text{Синдром}_{(ax_1)(1)} + \beta_{11}^{(2)} \cdot \text{Синдром}_{(ax_1)(1)} + \dots + \beta_{11}^{(n_1)} \cdot \text{Синдром}_{(ax_1)(1)}) \\ \dots \\ \text{Синдром}_{(n_1)(n_2)} = \text{Сигмоида}_2(\beta_{(n_1)(n_2)}^{(0)} + \beta_{(n_1)(n_2)}^{(1)} \cdot \text{Синдром}_{(ax_1)(n_1)} + \beta_{(n_1)(n_2)}^{(2)} \cdot \text{Синдром}_{(ax_1)(n_1)} + \dots + \beta_{(n_1)(n_2)}^{(n_1)} \cdot \text{Синдром}_{(ax_1)(n_1)}) \\ \dots \\ \text{Синдром}_{11} = \text{Сигмоида}_i(\beta_{11}^{(0)} + \beta_{11}^{(1)} \cdot \text{Синдром}_{11} + \beta_{11}^{(2)} \cdot \text{Синдром}_{11} + \dots + \beta_{11}^{(n_1-1)} \cdot \text{Синдром}_{11}) \\ \dots \\ \text{Синдром}_{(n_{i-1})(n_i)} = \text{Сигмоида}_i(\beta_{(n_{i-1})(n_i)}^{(0)} + \beta_{(n_{i-1})(n_i)}^{(1)} \cdot \text{Синдром}_{(n_{i-1})(n_i)} + \beta_{(n_{i-1})(n_i)}^{(2)} \cdot \text{Синдром}_{(n_{i-1})(n_i)} + \dots + \beta_{(n_{i-1})(n_i)}^{(n_{i-1})} \cdot \text{Синдром}_{(n_{i-1})(n_i)}) \\ \tilde{\sigma}_{0,2} = \beta_{(n_i)(вых)}^{(0)} + \beta_{(n_i)(вых)}^{(1)} \cdot \text{Синдром}_{11} + \beta_{(n_i)(вых)}^{(2)} \cdot \text{Синдром}_{12} + \dots + \beta_{(n_i)(вых)}^{(n_i)} \cdot \text{Синдром}_{(n_{i-1})(n_i)} \\ \sigma_{0,2} = \frac{\tilde{\sigma}_{0,2}[(\sigma_{0,2})_{\max} - (\sigma_{0,2})_{\min}] + [(\sigma_{0,2})_{\max} + (\sigma_{0,2})_{\min}]}{2} \end{array} \right.$$

где β – коэффициент уравнения;

i – номер скрытого внутреннего слоя обучаемой ИНС;

n_i – номер нейрона в i -ом скрытом слое;

k – номер входного нейрона;

$\tilde{\sigma}_{0,2}$ – кодированное расчетное значение предела текучести;

Шаг 3. Выполнить подстройку весов скрытого слоя:

$$W_{ij}(t+1) = W_{ij}(t) - h \frac{\partial E}{\partial W_{ij}}$$

Шаг 4. Повторить шаги 1-3 для всех обучающих векторов. Обучение завершается по достижении малой полной ошибки.

Параметр h называется темпом обучения и выбирается достаточно малым для сходимости метода. Как видно из описания шагов 2-3, обучение сводится к решению задачи оптимизации функционала ошибки градиентным методом. Наиболее целесообразно использовать 4 алгоритма обучения:

метод градиентного спуска,
метод сопряженных градиентов,
метод модифицированный ParTan,
квазиньютоновский метод BFGS.

Таким образом, для решения поставленной задачи имеем 1 топологию ИНС (с различной архитектурой) и 4 алгоритма обучения.

Архитектура выбранной ИНС представляет собой многослойный персептрон с одним или несколькими скрытыми слоями. Входной слой состоит из 15 входных сенсоров (нейронов) (концентрация ЛЭ и фактор «группа») для выборки I и 14 (концентрация ЛЭ) – для выборки II. Выходной слой из одного выходного сенсора – значение предела текучести.

Математическая модель соответствующей ИНС имеет вид системы взаимосвязанных уравнений типа:

$\sigma_{0,2}$ – расчетное значение предела текучести;
 $(\sigma_{0,2})$ – фактическое значение предела текучести;
 $\text{Синдром}_{n_{i-1} n_i}$ – сигнал с n_{i-1} нейрона на n_i нейрон.

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ПОДХОДЫ К ПРОЕКТИРОВАНИЮ НОВЫХ НИКЕЛЕВЫХ СТОМАТОЛОГИЧЕСКИХ СПЛАВОВ



Рисунок 1 – Главное окно системы автоматизированного проектирования НСС

Обучение ИНС проводилось в специально созданном для этой задачи программном пакете «Автоматизированное проектирование никелевых стоматологических сплавов» (рис. 1).

Проверку адекватности полученных с помощью метода ИНС математических моделей проводили при помощи сравнения табличного значения критерия Фишера с расчетным.

Оценку прогностических возможностей математической модели производили при помощи расчета коэффициента детерминации.

Помимо критерия Фишера и коэффициента детерминации для оценки адекватности

и прогностических возможностей математической модели использовались также дисперсия адекватности и средняя относительная ошибка аппроксимации.

Селекция полученных адекватных математических моделей производилась на основе их показателей адекватности и прогнозирования. Для сравнения этих показателей использовались 4 критерия: критерий Фишера, дисперсия адекватности, коэффициент детерминации, а также средняя относительная ошибка аппроксимации.

Однако для сравнения и селекции моделей с разным числом степеней свободы целесообразно использовать не простое сравнение расчетного критерия Фишера, а отношение его расчетного значения к табличному, так называемый параметр Бокса-Ветца.

Поэтому в качестве критериев селекции моделей использовались параметр Бокса-Ветца, дисперсия адекватности, коэффициент детерминации и средняя относительная ошибка аппроксимации (табл. 1).

Согласно методике селекции моделей, полученных методом ИНС, первое место среди выделенных моделей занимает модель №3 (табл. 1). Данная модель имеет наибольший параметр Бокса-Ветца и коэффициент детерминации, наименьшую дисперсию адекватности и вторую по значению среднюю относительную ошибку аппроксимации.

Таблица 1 - Критерии селекции полученных адекватных математических моделей по выборке I и по выборке II

№ модели	Параметр Бокса-Ветца	Дисперсия адекватности, МПа	Коэффициент детерминации	Средняя относительная ошибка аппроксимации, %
1	1,704	13781,33	0,506	14,553
2	1,732	13733,42	0,508	18,306
3	4,164	6209,88	0,778	12,963
4	1,196	17947,12	0,357	16,853
5	1,176	15317,31	0,451	14,300
6	2,049	9268,79	0,668	11,333
7	0,819	11832,11	0,576	14,286
8	2,350	11060,17	0,604	16,883
9	1,084	19761,62	0,292	13,390
10	2,119	12007,89	0,570	14,343
11	1,074	19376,61	0,306	19,182
12	2,209	9483,21	0,660	14,196
13	1,005	17884,39	0,360	18,870
14	2,131	9501,38	0,660	15,818
15	1,093	12453,42	0,544	17,775
16	1,168	11784,12	0,577	16,120

Таким образом, предложенный подход, основанный на методе нейросетевого прогнозирования свойств композиционных материалов, показывает его эффективность и является

весьма практичным, представляющим целесообразность его использования наряду с традиционными и статистическими методами разработки новых сплавов.