

Решение обратной задачи нахождения эффективных свойств метаматериала-ауксетика с помощью алгоритмов машинного обучения.

Научный руководитель – Вершинин Анатолий Викторович

Танасевич Полина Сергеевна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Механико-математический факультет, Кафедра вычислительной механики, Москва,
Россия

E-mail: apollinaria777@mail.ru

В работе решается обратная задача нахождения эффективных свойств метаматериала [1] - эффективных модуля Юнга (E) и коэффициента Пуассона (ν). Метаматериал - это композиционный материал, свойства которого определяются геометрией периодической решётчатой конструкции, а не природой его компонент. Отличительная особенность ауксетика - отрицательный коэффициент Пуассона, который достигается за счет геометрических особенностей модели. Задача решения обратной задачи нахождения эффективных свойств с помощью алгоритмов машинного обучения ставится в двумерном случае для модели метаматериала, который задается тремя параметрами - углом, высотой и шириной (параметры, которые хотим получить на выходе). Параметризованная модель ячейки двумерной решётчатой структуры построена с помощью геометрического модуля пакета «Fidesys» [2]. Ранее для построенных ячеек проведены численные эксперименты, в которых показано влияние геометрических параметров модели на коэффициент Пуассона, который вычислялся с помощью модуля Fidesys Composite [3] отечественной САЕ-системы «Fidesys». Свойства компонент задавались модулем Юнга и коэффициентом Пуассона. Далее таким образом генерируются 10,000 моделей с соответствующими параметрами. Для обучающей выборки используются 80% данных, для тестовой - 20%. С помощью применяемой в задаче модели машинного обучения можно предсказать по желаемым эффективным коэффициентам (модуль Юнга и коэффициент Пуассона) - параметры модели метаматериала (угол, толщину и ширину). Для проверки модели машинного обучения и ее совершенствования используется метрика MSPE, которая представляет собой относительную ошибку, где разность между наблюдаемым и фактическим значениями делится на наблюдаемое значение и выражается в процентах. Данная метрика нечувствительна к выбросам, а также хорошо интерпретируема. Для решения обратной задачи используется метод k -ближайших соседей (KNN) для задачи регрессии (не дискретное распределение данных), основанный на поиске ближайших объектов с известными значениями целевой переменной. В нем последовательно выполняются следующие операции: вычисление расстояния до каждого из объектов обучающей выборки, а также выбор k объектов обучающей выборки, расстояние до которых минимально (настраиваемые гиперпараметры подбирались с помощью GridSearchCV). KNN устойчив к выбросам и аномальным значениям, поскольку вероятность попадания содержащих их записей в число ближайших соседей мала. В результате, на тестовом наборе данных средний процент ошибки между предсказанными данными и фактическими, то есть метрика MSPE, составляет 3%. Таким образом, решена обратная задача нахождения эффективных свойств метаматериала-ауксетика типа бабочка с помощью алгоритма машинного обучения KNN в 2D случае.

Источники и литература

- 1) Xiaoyang Zheng, Ta-Te Chen, Xiaofeng Guo, Sadaki Samitsu, Ikumu Watanabe. Controllable inverse design of auxetic metamaterials using deep learning // Materials and Design 211(11):110178
- 2) Официальный сайт ООО «Фидесис» [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://cae-fidesys.ru/>
- 3) Vdovichenko I.I., Yakovlev M.Ya., Vershinin A.V., Levin V.A. Calculation of the effective thermal properties of the composites based on the finite element solutions of the boundary value problems [Электронный ресурс] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, V. 158, I. 1, 2016. – Article 012094. – Режим доступа: <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1757-899X/158/1/012094/pdf>