Prognozowanie właściwości mechanicznych i elektrycznych kompozytów cementowych z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych

mgr inż. Sofija Kekez

Rozszerzone streszczenie

Projektowanie mieszanki betonowej można zdefiniować jako technikę ustalania najbardziej opłacalnego i optymalnego składu mieszanki betonowej, przy jednoczesnym spełnieniu wymagań dotyczących własności mechanicznych, takich jak urabialność, wytrzymałość oraz trwałość. Takie podejście staje się niezbędne w budownictwie ze względu na rosnące ceny materiałów tradycyjnych i niedawne wdrażanie materiałów alternatywnych. Przy budowie konstrukcji o dużych gabarytach, takich jak zapory lub konstrukcje wymagające dużej wytrzymałości betonu, takie jak wieżowce, długie mosty czy innego typu mega konstrukcje, projektowanie mieszanki betonowej zapewnia osiągnięcie wymaganych właściwości betonu, a jednocześnie utrzymuje użycie kosztownych składników na niezbędnym minimum, dzięki czemu budowa jest opłacalna ekonomicznie. Wdrożenie i°zastosowanie jakiejkolwiek nowatorskiej metody projektowania mieszanek betonowych jest nadal *stricte* dziedziną badań; jednak praca ta ma na celu przybliżenie jej do praktyki stosowanej w inżynierii lądowej. Ponieważ optymalne mieszanki są zwykle opracowywane w stosunkowo długim procesie prób i błędów, co czyni ich wytwarzanie kosztownym przedsięwzięciem, w niniejszej pracy badawczej skupiono się na możliwościach szybszej i°bardziej opłacalnej ustalania składu. Ogólna klasyfikacja metod stosowanych w°projektowaniu mieszanek betonowych obejmuje metody analityczne, półeksperymentalne, eksperymentalne i statystyczne. W pracy zaproponowano metodę klasyfikowaną jako półeksperymentalną, ponieważ obejmuje ona zarówno testowanie eksperymentalne, jak i°zastosowanie narzędzi analitycznych, w tym przypadku analizy numerycznej i techniki uczenia maszynowego zwanej sztucznymi sieciami neuronowymi. Celem tej nowatorskiej metody jest przewidzenie zachowania się betonu zbrojonego CNT/CNF poprzez włączenie symulacji numerycznych w programie ANSYS, aby zastąpić pracę laboratoryjną, oraz zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do przewidywania wytrzymałości na ściskanie, wytrzymałości na zginanie i objętościowej oporności elektrycznej materiału cementowego materiału kompozytowego.

Projektowanie mieszanki betonowej, jak już wspomniano, służy do optymalizacji mieszanki betonowej i zbadania możliwości dodawania materiałów, takich jak plastik z°recyklingu, kruszywo z recyklingu, różne rodzaje nanomateriałów, itp. Najpopularniejsze nanomateriały stosowane w matrycy betonowej to sadza, C60, nano-TiO2, nano-Fe2O3, nanorurki węglowe, nanowłókna węglowe i grafen. Nanomateriały są szczególnie atrakcyjne jako materiał wypełniający w matrycy betonowej, ponieważ mogą zapewniać betonowi

dodatkowe funkcje, w tym samooczyszczanie, samonaprawianie, samoczynne wykrywanie i°inne. Dlatego też materiał kompozytowy z betonu nano-zbrojonego jest doskonałym wyborem dla konstrukcji wielofunkcyjnych. Praca dotyczy betonu zbrojonego nanorurkami węglowymi (CNT) lub nanowłóknami węglowymi (CNF) o ulepszonych właściwościach mechanicznych oraz dodatkowej zdolności wykrywania naprężeń wewnętrznych. Zdolność samodetekcji może być bardzo istotna dla rozwoju nowych systemów detekcyjnych i ogólnie, dla dziedziny monitorowania konstrukcji. Jeśli wykrywanie jest możliwe w samym materiale, monitorowanie struktury może być stałe i samowystarczalne, jeśli jest wyposażone w potężny procesor i system przechowywania danych. Obecnie beton samo-mierzący się nie jest wykorzystywany w praktyce budowlanej, częściowo ze względu na brak odpowiedniego sprzętu (czujników), a częściowo ze względu na wysokie koszty stosunkowo eksperymentalnego materiału. Czujniki to urządzenia, które reagują na bodźce fizyczne, wytwarzając sygnał elektryczny, w którym czujnik przekształca parametry fizyczne na sygnał elektryczny, który jest następnie przekształcany na wartość cyfrową za pomocą obwodów kondycjonowania sygnału i przetwornika analogowo-cyfrowego. Elementy te tworzą system akwizycji danych, który przetwarza sygnały elektryczne, przekształcając je w wartości cyfrowe i umożliwiając dalszą manipulację przez komputer. Czujniki piezorezystancyjne opierają się na efekcie piezorezystancyjnym, wykorzystującym zmianę oporności elektrycznej materiału, gdy jest on odkształcany pod przyłożonym naprężeniem. Ponieważ beton zbrojony CNT/CNF wykazuje zachowanie piezorezystancyjne, można go używać jako czujnika piezorezystancyjnego.

W niniejszej rozprawie zaproponowano nową metodę projektowania mieszanek żelbetowych CNT/CNF oraz zbadano możliwości wykluczenia badań eksperymentalnych poprzez zastosowanie narzędzi analitycznych. Po teoretycznej analizie wytwarzania i°zachowania betonu zbrojonego CNT/CNF pod względem chemicznym i elektronicznym, badania koncentrują się na badaniach eksperymentalnych materiałów kompozytowych. W°związku z tym badanie śledzi proces wytwarzania pod kątem prawidłowej dyspersji nanowypełniacza, osiągnięcia progu perkolacji i sieci przewodzących prąd w osnowie izolacyjnej, a na końcu zapewnienia wysokiej jakości produktu końcowego. Prace eksperymentalne z tej tematyki można znaleźć w literaturze. W analizowanych pracach wykorzystano metody statystyczne do uzyskania receptur mieszanin poprzez zróżnicowanie udziału wagowego badanych następnie nanowypełniaczy. Ponadto, podano szczegółowe opisy składników mieszaniny, dyspersji nanowypełniacza, wytwarzania kompozytu, badań oraz standardów, które zastosowano w doświadczeniach. Wszystkie prace mają ten sam rodzaj podstawowych składników do izolacyjnej matrycy betonowej. Mianowicie zwykły cement portlandzki (OPC) zawierający ograniczone ilości siarczanu wapnia (do 5%) i innych drobnych składników (do 5%) o klasach wytrzymałości 42,5 i 52,5. OPC jest podstawowym materiałem wiążącym, a wysoka czystość jest tak dobrana, aby ewentualne dodatkowe lub

nieoczekiwane czynniki wpływające na właściwości betonu zostały zredukowane do minimum. Do dyspersji nanowypełniaczy wykorzystywana jest woda destylowana, a do mieszania betonu wykorzystywana jest woda wodociągowa lub destylowana. Stosunek w/c obejmował całkowitą ilość wody użytej zarówno do dyspersji nanowypełniacza, jak i do mieszania betonu. Zgodnie z minimalizacją czynników zagrażających jakości betonu, jako kruszywo drobnoziarniste stosuje się standaryzowany naturalny lub sztuczny piasek krzemionkowy, natomiast w przypadku kruszywa grubego żwir lub tłuczeń kamienny. Nanowypełniacze to wielościenne nanorurki węglowe (CNT) i nanowłókien węglowych (CNF), oba o czystości około 99%. Ze względu na obecność nanowypełniaczy stosuje się niektóre materiały dodatkowe w celu uzyskania lepszej dyspersji i mieszania materiałów oraz uniknięcia zjawisk takich jak segregacja, aglomeracja czy nadmierne pienienie. Materiały te to środki powierzchniowo czynne, superplastyfikatory i/lub środki zmniejszające pienienie (odpieniacze). Materiały te służą do zapewnienia wysokiej jakości dyspersji nanomateriałów i°zapewnienia jakości mieszanki betonowej. Niektóre dyspersje uzyskuje się bez pomocy jakiegokolwiek środka powierzchniowo czynnego. W ramach analizowanych prac badawczych powstawały zaczyny cementowe, zaprawy z kruszywem drobnym lub beton z°kruszywem drobnym i grubym. Testy mechaniczne obejmowały testy zginania trzy- i°czteropunktowego oraz test ściskania osiowego. Testy elektryczne obejmowały metody dwu- i czterosondowe. Normy stosowane w analizowanych pracach to Eurokod (EN), Indyjska Norma (IS), Amerykańskiego Instytutu Betonu (ACI), Hiszpańskiego Stowarzyszenia Normalizacyjnego (UNE) oraz Amerykańskiego Towarzystwa Badań i°Materiałów (ASTM). Spośród 49 analizowanych eksperymentów, 13 zostało odrzuconych z°następujących powodów: niejasny proces wytwarzania próbek; nieznormalizowana geometria próbek; niewłaściwa dyspersja nanowypełniaczy (wysoki próg perkolacji); wstępnie zdyspergowane CNT dające tylko ułamek wagowy domieszki; występowanie pogorszenia właściwości mechanicznych i elektrycznych po dodaniu nanowypełniaczy; oraz określenie wytrzymałości na rozciąganie za pomocą próby osiowego rozciągania. Wreszcie dane objęły 429 mieszanin, z których 207 przetestowano pod kątem wytrzymałości na zginanie, 329 mieszanin przetestowano pod kątem wytrzymałości na ściskanie, a 223 mieszanki przetestowano pod kątem przewodności elektrycznej, rezystancji lub rezystywności. Mieszaniny te były później przedstawiane sztucznym sieciom neuronowym jako zbiory danych do nauki sieci w grupie I danych.

W tym badaniu zastosowano symulacje numeryczne w celu ustalenia, czy możliwe jest wykorzystanie oprogramowania ANSYS jako substytutu badań eksperymentalnych próbek żelbetowych CNT/CNF. Analizy i symulacje przeprowadzane są na podstawie badań eksperymentalnych. Modele materiałów są opracowywane przy użyciu programu Material Designer, a wyniki są wykorzystywane do tworzenia obszernej biblioteki materiałów. Ta biblioteka materiałów jest później stosowana w symulacjach badań mechanicznych próbek,

a°mianowicie w próbie trójpunktowego zginania i próbie ściskania osiowego z użyciem Static Structural. Wyniki są walidowane przez porównanie z wynikami badań eksperymentalnych, z°uwzględnieniem zgodności geometrii i rodzaju testu. Modele materiałowe są opracowywane przy użyciu Random UD Composite RVE. Mikrostruktura betonu jest niejednorodna i wszystkie trzy stany kruszywa są obecne w mezostrukturze betonu, jednak Material Designer nie jest w stanie rozpoznać różnych stanów kruszywa materiałów. Ponadto, struktura betonu składa się z cząstek cementu i wody na poziomie mikro, podczas gdy materiały kruszywa drobnego i grubego mają minimalną wielkość odpowiednio 1-2 mm i 2-16 mm, a zatem występują tylko w skali makro. Tego nie można opisać w programie Material Designer. Ze względu na ograniczenia Material Designera matryca betonowa nie jest modelowana jako kompozyt wszystkich składników, ale jako materiał jednorodny. Random UD Composite RVE jest definiowany przez geometrię włókna, w tym udział objętościowy włókna, średni kąt niewspółosiowości, nasiona, średnicę włókna i liczbę powtórzeń. Parametryzacja jest wykonywana dla ułamka objętościowego włókien, tak aby każda grupa kompozytów miała odpowiednie wartości. Czas trwania generowania RVE i siatki zależy od uziarnienia i parametru liczby powtórzeń. Ustalono, że dla mniejszych frakcji wagowych włókien, od 0,01-0,1% wag., lepiej jest stosować mniejszy średni kąt niewspółosiowości i°liczbę powtórzeń, podczas gdy uziarnienie powinno być utrzymywane między 15000 a°25000. Dla frakcji wagowych powyżej 0,1 % wag., średni kąt niewspółosiowości można zwiększyć do 5 lub nawet 10 dla frakcji powyżej 1% wag. Uziarnienie powinno stale rosnąć zgodnie z frakcją, dochodząc do około 70000 dla 2% wag. Wykorzystywane jest tylko siatkowanie konformalne, bez limitu maksymalnego rozmiaru FE. Ustalono, że ograniczenie rozmiaru oczek prowadzi do trudności w zapewnieniu przez model pełnej siatki pomiędzy osnową a materiałami włóknistymi. Konformalne zazębienie zbiega się ze stosunkowo nieregularną geometrią między dwoma materiałami.

Po ujednorodnieniu w Material Designer, w Engineering Data podaje się gęstość i°tensor sprężystości materiału izotropowego. Space Claim służy do budowy geometrii próbek do testów ściskania i zginania, zgodnie z realistycznymi ustawieniami testowymi dla testu ściskania osiowego i testu trzypunktowego zginania zgodnie z Eurokodem. Stąd próbki do badania zginania są małymi belkami, a próbki do badania ściskania reprezentują małe belki podzielone na pół. Mechanical Part modelu Static Structural definiuje siatkę modelu, podpory, obciążenia i ustawienia analizy. Siatkowanie obu typów próbek obejmuje heksagonalne elementy skończone (Hex8, Hex20) o grubości 2 mm, typ SOLID185. Liniowe elementy SOLID185 to 8-węzłowe trójwymiarowe elementy skończone stosowane w°konstrukcjach grubopowłokowych i litych. Analiza liczby i jakości elementów siatki pokazuje, że wszystkie elementy w modelu ściskania i zginania mają ten sam rozmiar i°kształt. Rozmiar FE w obu przypadkach wynosi 2 mm; dlatego model ściskania ma 8000 elementów, a model zginania ma 16768 elementów, co zapewnia stosunkowo szybką analizę

statyczną. Na symulację obciążenia wskazuje wytrzymałość graniczna referencyjnego zwykłego materiału betonowego z badań eksperymentalnych. Konfiguracja testu ściskania oznacza, że cała dolna powierzchnia jest w pełni podparta, a cała górna płaszczyzna jest obciążona. Obciążenie modelu jest przedstawiane jako przemieszczenie górnej powierzchni, które jest wprowadzane w postaci tabelarycznej, aby zapewnić stały wzrost naprężeń. Analiza naprężeń zawiera podetapy w ciągu jednej sekundy od niejawnej analizy statycznej. Minimalna liczba kroków to 10, a maksymalna to 20, aby zapewnić analizę przyrostową przy zachowaniu szybkości zbieżności. Model testu zginania obejmuje dodatkowe elementy w°postaci podpór i obciążnika. Powierzchnie styku pomiędzy elementami wsporczymi a°belką są określane jako kontakty „bez separacji", gdzie elementy są w pełni połączone z°dopuszczalnym poślizgiem. Przemieszczenie jest ustawione na zero we wszystkich kierunkach globalnych dla obu podpór. Mimo że statycznie wiązania występują tylko w°pionowym i poziomym kierunku wzdłużnym, ta konfiguracja pomaga oprogramowaniu szybciej i łatwiej osiągać zbieżność. Element obciążający przenosi siłę z prasy na belkę. W°związku z tym, typ kontaktu między elementem obciążającym a belką jest „związany", a°pionowe przemieszczenie jest zapewnione na górnej powierzchni.

Wyniki analizy statycznej są reprezentowane przez maksymalne, minimalne i średnie wartości maksymalnego naprężenia głównego, minimalnego naprężenia głównego i°naprężenia normalnego. Zaobserwowano, że w niektórych przypadkach moduł Younga materiału kompozytowego jest nawet wyższy niż 200 GPa, a wytrzymałość na zginanie przekracza wartość 20 MPa. Można śmiało powiedzieć, że jest to przeszacowanie i nie miałoby to miejsca w realistycznych warunkach. Jednak wyniki pokazują dość realistyczne zachowanie materiałów dla materiałów kompozytowych o ułamkach wagowych do 0,1%. Zatem dla mniejszej frakcji wagowej nanowypełniacza wyniki wydają się obiecujące i°sugerują potrzebę dalszych badań. Jeśli chodzi o udziały wagowe powyżej 0,1%, można stwierdzić, że mikrostrukturę należy dokładnie zamodelować od dołu do góry, uwzględniając poszczególne materiały składowe i bardziej realistycznie modelując nanowypełniacze pod kątem ich wzajemnego oddziaływania oraz układu w osnowie betonowej. Podobnie wyniki testu ściskania z trudem pokazują realistyczną sytuację. Chociaż w większości przypadków następuje wzrost wytrzymałości, wzrost ten nie jest realistyczną wartością, jaką nanowypełniacze faktycznie zapewniają matrycy betonowej. Można zaobserwować, że wytrzymałość na ściskanie zmienia się w nieznacznym stopniu, przy maksymalnym wzroście o 1 MPa. Badania eksperymentalne obejmowały mniejsze różnice we frakcjach wagowych nanowypełniacza, dlatego walidację przeprowadzono dla łącznie 51 mieszanek cementowych, w tym betonu zwykłego i nano-zbrojonego. Wszystkie obserwowane badania eksperymentalne obejmowały próbki o tej samej geometrii (40×40×160 mm) i rodzaju badania (zginanie 3-punktowe). Można zaobserwować, że różnica między badaniami eksperymentalnymi a symulacjami numerycznymi zarówno mieszanek betonu zwykłego, jak

i°zbrojonego jest znacznie większa niż w przypadku wytrzymałości na ściskanie i sięga około 110%. To zdarzenie nie może być uznane za możliwe. Jak dotąd nie ma dowodów na tak duży wzrost wytrzymałości, niezależnie od materiałów dodatkowych czy sposobu wykonania materiału kompozytowego. W związku z tym wyniki symulacji wytrzymałości na zginanie nie są realistyczne i dlatego nie należy ich uważać za akceptowalne. Niemniej jednak wyniki symulacji numerycznych są wykorzystywane do dalszej analizy przez sztuczne sieci neuronowe. W sumie 164 mieszaniny są prezentowane SSN jako zbiory danych Grupy II.

Metody uczenia maszynowego mogą ustalić nieliniowe zależności między czynnikami efektu poprzez minimalizację błędu poprzez regresję z wyjątkowo wysoką dokładnością wyników. Chociaż istnieje wiele technik uczenia maszynowego i jeszcze więcej rodzajów każdej techniki, a także ich kombinacji, niniejsza praca koncentruje się na podstawowym programowaniu modeli sztucznych sieci neuronowych, aby zapewnić podstawę do dalszych badań zastosowania uczenia maszynowego w optymalizacja proporcji mieszanki betonu z°nanowypełniaczem CNT/CNF. Sztuczne sieci neuronowe są opracowywane w programie Matlab R2020b przy użyciu narzędzia do dopasowania neuronowego i edytora skryptów. Sieci są szkolone z wykorzystaniem zarówno wyników eksperymentalnych (Grupa I), jak i°liczbowych (Grupa II), aby ustalić możliwość zastosowania tych metod w praktyce inżynierskiej. Modele są budowane przy użyciu narzędzia NF i bezpośrednio przy użyciu skryptu. Po przetestowaniu modeli SNN z każdej grupy, wyniki i zachowanie modeli SNN są porównywane w celu ustalenia zasadności wykorzystania wyników symulacji ANSYS zamiast wyników testów eksperymentalnych. Architektura SSN obejmuje liczbę warstw i°liczbę neuronów w każdej warstwie, a także typ algorytmu i funkcję aktywacji. W niniejszej pracy wszystkie modele sieci neuronowych mają stałe parametry uczenia się, aby zapewnić właściwe porównanie modeli w ramach obu grup. Ustalając parametry uczenia się, zmieniając tylko liczbę ukrytych neuronów i proporcje podzbiorów, powinno być możliwe ustalenie, jaki typ architektury najlepiej pasuje do każdej grupy i podgrupy modeli. Całkowita liczba warstw we wszystkich modelach ANN wynosi trzy, w tym warstwa wejściowa, jedna ukryta i°warstwa wyjściowa. Ten typ architektury nazywany jest siecią „płytką" i jest powszechnie używany w przypadku stosunkowo małych zbiorów danych dotyczących liczby neuronów wejściowych i krotek danych. Liczba ukrytych neuronów jest powiązana z liczbą neuronów w°warstwach wejściowych. Praca ta wykorzystuje dwie zależności podane w literaturze i°proponuje dodatkową zależność do testowania i obserwowania zachowania modeli. Modele sieci neuronowych są dodatkowo rozwijane przez bezpośrednie ręczne skryptowanie w°programie Matlab R2020b. W ten sposób dostępnych jest więcej opcji w zakresie architektury oraz procesu szkolenia i optymalizacji. Wszystkie modele ANN są początkowo trenowane przy użyciu 80% pełnego zestawu danych, który jest stosowany tylko do trenowania i walidacji. Walidacja jest wykorzystywana w tym momencie do zatrzymania procesu uczenia, a podzbiory uczenia/walidacji są ustawione na stosunek 85/15 dla etapu

początkowego i optymalizacji. Na początkowym etapie liczba ukrytych neuronów jest równa liczbie neuronów wejściowych. Później jest dostosowywana na podstawie wyników optymalizacji i testowania. Po wstępnym treningu topologia jest optymalizowana poprzez iterację liczby neuronów w warstwie ukrytej odpowiednio od jednego do $3 \cdot Ni$. Optymalizacja początkowego modelu ustala optymalną liczbę neuronów w warstwie ukrytej. Ulepszona topologia sieci oznacza lepsze uogólnienie i przyczynia się do stabilności sieci. Na optymalizację wskazuje poziom i zmiana błędu średniokwadratowego dla różnej liczby neuronów w warstwie ukrytej. Następnie wybierane są dwie wartości do dalszego testowania na podstawie wyników optymalizacji. Te dwa modele są testowane z pozostałymi 20% zbioru danych i na podstawie wyników testów wybierana jest pojedyncza topologia jako ostateczny model roboczy. Ostateczny działający model sieci ANN jest następnie szkolony przy użyciu pełnego zestawu danych i bez żadnych ograniczeń. Oznacza to, że trening trwa do momentu osiągnięcia minimalnego gradientu treningowego 10e-7. Jeśli gradient nie zostanie osiągnięty, gdy trening osiągnie tysiąc iteracji, zostanie natychmiast zatrzymany.

Wyniki dla całkowitego współczynnika regresji niższego niż R=0,8 są uznawane za niezadowalające. Ocena SSN została podana dla modeli opracowanych za pomocą narzędzia NF, które wykazały najlepsze zachowanie. Zbiory danych są losowo podzielone na dwa podzbiory zgodnie ze stosunkiem 80/20, przy użyciu 80% odpowiedniego zestawu do powtarzanego treningu, a następnie testowania z wykorzystaniem pozostałych 20% zestawu. Analiza czułości pokazuje bezwzględny lub względny udział każdego parametru wejściowego w wartości wyjściowej. Może również wpływać na topologię końcowego modelu roboczego, ponieważ może wskazywać, że jakiś parametr może pogorszyć lub spowolnić proces uczenia się. Z drugiej strony pokazuje, które parametry są kluczowe. W pracy zastosowano metodę wag, zwaną inaczej algorytmem Garsona. Algorytm został stworzony specjalnie dla nadzorowanych sieci neuronowych z pojedynczym wyjściem, aby opisać względne znaczenie parametrów wejściowych poprzez dekonstrukcję wag modelu.

Modele ze zbiorów danych, które jako dane wyjściowe podają właściwości mechaniczne, wykazują zadowalające wyniki przy wartościach współczynnika regresji powyżej 0,8. W przypadku zalecanych modeli zarówno dla Grupy I, jak i Grupy II, najbardziej regularny rozkład błędu uzyskuje się, gdy liczba ukrytych neuronów jest równa liczbie neuronów wejściowych. Inny przypadek pokazuje, że model, który ma liczbę ukrytych neuronów równą $Nh°=°2Ni+1$, zachowuje się najlepiej w swojej podgrupie. Niemniej jednak modele z $Nh°=°3Ni$ również wykazywały zachowanie porównywalne z innymi modelami, potwierdzając założenia tej pracy. Ponieważ modele te wykazują zadowalające wyniki, przeprowadzono ocenę. Wartości R modeli ewaluacyjnych są porównywane z wynikami wstępnego szkolenia. W niektórych przypadkach współczynniki regresji modeli oceny są wyższe niż początkowe wartości R. Może się to zdarzyć ze względu na korzystny rozkład krotek podczas randomizacji lub fakt, że oceniane modele są trenowane na mniejszym zbiorze

danych. Różnica między wartościami nie przekracza 0,1, co oznacza, że ważność początkowych modeli jest potwierdzona. Ocena modeli początkowych pozwala stwierdzić, że wszystkie modele wykazywały zadowalające zachowanie przy danych topologiach. Odpowiedzi modeli ANN, które zostały opracowane przy użyciu edytora skryptów w°programie Matlab R2020b, są obserwowane na każdym etapie rozwoju: odpowiednio początkowym, optymalizacji, testowym i roboczym. Każdy zestaw danych jest używany do opracowywania jednego modelu na poprzednich etapach. początkowa topologia obejmowała równą liczbę neuronów wejściowych i ukrytych. Wyniki są zadowalające dla wszystkich modeli z właściwościami mechanicznymi na wyjściu. Niemniej jednak topologie są zoptymalizowane. Optymalizacja polegała na iteracyjnej zmianie liczby neuronów w°warstwie ukrytej, zaczynając od jedności, a kończąc na wartości trzykrotności liczby neuronów wejściowych, a następnie zmieniając pierwiastek błędu średniokwadratowego dla uczenia i walidacji. Przewidziano testowanie zoptymalizowanych modeli dla topologii, która dała lepszą odpowiedź sieci podczas procesu optymalizacji. Testowanie przeprowadza się za pomocą funkcji symulacji z wykorzystaniem 20% pełnego zestawu danych. Po przetestowaniu ostateczne modele robocze są szkolone przy użyciu pełnego odpowiedniego zestawu danych. Trening jest wykonywany bez żadnych innych podzbiorów, jak zostało to opisane wcześniej. Uzyskane współczynniki regresji dla wszystkich modeli są bardzo wysokie, przy R>0,99, gdy proces uczenia nie jest ograniczony niczym innym niż gradient uczenia się i liczba iteracji.

Zalecane modele ze zbioru danych z opornością elektryczną jako wyjściem (RESIST) dały wartości współczynnika regresji znacznie niższe niż oczekiwany limit 0,8, co w tej pracy zostało uznane za niezadowalające. Prowadzone są dalsze badania, aby spróbować ustalić źródło tego zachowania. W związku z tym zrewidowano zbiór danych RESIST. Poprzednie wyniki eksperymentalne, które wykazały, że próg perkolacji nie został osiągnięty, zostały pominięte w zbiorze danych przy założeniu, że uczenie sieci nie powiodło się z powodu niespójnego zachowania próbek. Jako wartości odstające odrzucono również wyniki, które wykazały relatywnie wyższą rezystywność dla wyższego udziału wagowego nanowypełniacza w porównaniu z innymi próbkami z tej samej grupy próbek. Ponadto dodano neuron wejściowy, który podał powierzchnię przekroju poprzecznego próbki, aby spróbować wzbogacić sieć o więcej punktów uczenia się. Po zakończeniu rewizji nowy zbiór danych został znormalizowany w ten sam sposób i przygotowany do szkolenia. Poza wzrostem liczby neuronów wejściowych, a tym samym liczby neuronów ukrytych, nie było innych zmian w dwunastu nowych modelach. Wyniki zrewidowanych modeli RESIST pokazują, że zachowanie modeli nie uległo poprawie po zmianie początkowego zbioru danych. Możliwym wyjaśnieniem może być to, że próbki referencyjne bez nanowypełniaczy można uznać za wartości odstające dla całego zbioru danych. Na przykład, w obrębie jednej grupy próbek, wartość rezystywności zwykłej próbki wynosi 7700000 μcm, podczas gdy

rezystywność po osiągnięciu progu perkolacji z 0,048% wag. CNT wynosi 360000 µcm. W°związku z tym referencyjną niewzmocnioną próbkę można uznać za odstającą od zbioru danych. To założenie sugerowałoby, że zbiór danych wymaga dalszej korekty, jednak dalsza korekta skompresuje zbiór danych do punktu niestabilności uczenia się, ponieważ całkowita liczba krotek wyniosłaby około 100. Dlatego najlepiej byłoby przeprowadzić kompleksowe badanie eksperymentalne, aby uzyskać bardziej stabilne wyniki. Modele skryptowe dla zbioru danych RESIST wykazały podobne zachowanie, gdzie wartości R są nieco wyższe, ale wciąż poniżej wartości 0,8, a zatem niezadowalające. Badanie to obejmowało podejście wielofizyczne do zastosowania symulacji numerycznych i sztucznych sieci neuronowych do przewidywania właściwości mechanicznych i elektrycznych cementowych materiałów kompozytowych wzmocnionych CNT/CNF. Można zdefiniować następujące wnioski:

- *właściwości mechaniczne i elektryczne ulegają poprawie dzięki obecności nanowypełniacza CNT lub CNF.* Wykazano, że w przypadku uzyskania odpowiedniej dyspersji oraz wykonania mieszania i formowania betonu zgodnie z normą znacznie poprawiają się właściwości mechaniczne materiału kompozytowego;
- *modele numeryczne żelbetu CNT/CNF nie mogą realistycznie reagować na bodźce mechaniczne.* Modele ANSYS betonowego materiału kompozytowego CNT/CNF wykazały obiecujące wyniki tylko dla maksymalnie 0,1% wag. nanowypełniacza;
- *zachowanie mechaniczne żelbetu CNT/CNF można przewidzieć za pomocą sztucznych sieci neuronowych. Zachowania elektrycznego żelbetu CNT/CNF nie można przewidzieć za pomocą sztucznych sieci neuronowych.* Brak wyczerpujących informacji na temat zachowania elektrycznego tych materiałów prowadzi do niewystarczających materiałów do nauki sieci neuronowej. Pokazano, jak można uzyskać tylko fałszywie pozytywne wyniki;
- *liczba neuronów w ukrytej warstwie ANN równa $Nh=3 \cdot Ni$ może dostarczyć trafnych przewidywań.* Przyjęta wartość liczby ukrytych neuronów daje bardzo dobre wyniki i nie wykazuje przepełnienia sieci w tej pracy.

Ideą tej pracy jest to, że zastosowanie symulacji numerycznych i sztucznych sieci neuronowych do projektowania materiałów i przewidywania zachowania betonu zbrojonego CNT/CNF może być podstawą nowej techniki projektowania mieszanek, która zminimalizuje lub całkowicie wykluczy czas czasochłonne i kosztowne testy eksperymentalne. W tym celu należy rozwiązać powyższe kwestie dotyczące zachowania elektrycznego i modelowania materiałowego materiałów kompozytowych. Propozycja dalszych prac zakłada przeprowadzenie kompleksowych badań eksperymentalnych właściwości elektrycznych przy zachowaniu stałych czynników laboratoryjnych i eksperymentalnych. Co więcej, ustanowienie odpowiedniego oprogramowania, które może wspierać modelowanie mikrostrukturalne i obejmować mezostruktury betonu, rozwiązałoby problem występujący w°ANSYS, a także zapewniłoby symulacje testów elektrycznych.

Sofia Kekez, 20.06.2022 r.