

УДК 004.032

ОБ ОРГАНИЗАЦИИ АРХИТЕКТУР И АЛГОРИТМОВ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЖАРОПРОЧНОСТИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ

Н. И. Юсупова¹, О. С. Нургаянова², Р. А. ФАРРАХОВ³

¹yussupova@ugatu.ac.ru, ²onurgayanova@yandex.ru, ³framaz@yandex.ru

ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» (УГАТУ)

Поступила в редакцию 29 сентября 2021 г.

Аннотация. Рассматриваются методы прогнозирования жаропрочности никелевых сплавов по заданному химическому составу при помощи полносвязных нейронных сетей (многослойных перцептронов) и ансамбля моделей, полученного на основе них. Приводится подробное описание используемых методов обучения и тестирования сетей и ансамбля моделей. Отдельное внимание уделено подходам, позволяющим повысить точность предсказаний. Кратко дается представление о реализации используемых алгоритмов с помощью фреймворков Tensorflow и Tensorflow Keras. Приводится сравнение результатов работы нейросетей для различных сплавов.

Ключевые слова: искусственные нейронные сети; ансамбли моделей; полносвязная нейронная сеть; алгоритм обучения; жаропрочные никелевые сплавы; прогнозирование свойств; Tensorflow; Keras; Python.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема поиска новых составов жаропрочных сплавов для газотурбинных двигателей наметилась еще в начале 1930-х годов. Фактором, ограничивающим скорость работы сверхзвуковых самолетов на газотурбинных двигателях, является высокая рабочая температура, превышающая 1500 °С, и чтобы избежать деформации лопаток при работе двигателя в таком режиме требуется использование материалов с повышенными свойствами [1–3].

Жаропрочность – способность конструкционных материалов работать под напряжением в условиях повышенных температур без заметной остаточной деформации и разрушения. Жаропрочность сплавов зачастую определяется экспериментальным путем, однако эксперименты, как правило, слишком дорогостоящие, занимают дли-

тельное время и требуют расхода множества ресурсов. В связи с этим встает вопрос о возможности прогнозирования свойства жаропрочности сплава по его химическому составу.

Для решения этой задачи можно применить ряд методов, таких как регрессия, оптимальное планирование эксперимента и т.д. Однако у многих из них есть один существенный недостаток – требуется иметь хотя бы примерное представление о виде зависимости между химическим составом сплавов и их жаропрочностью при заданной температуре. Нейронные сети же позволяют избежать этой проблемы, поскольку в процессе их обучения на некоторой заданной выборке, благодаря их способности к обобщению, в неявном виде они позволяют определить вид этой зависимости [4].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Имеется информация об исходном множестве жаропрочных сплавов (исходная выборка). Для каждого сплава из выборки известны доли содержания различных легирующих элементов, жаропрочность при определенных температурах.

Пусть дано множество Y , состоящее из n измерений жаропрочности сплавов; y_i – жаропрочность i -го измерения; c_i^j – доля содержания в i -ом сплаве j -го химического элемента; t_i – температура.

Тогда задача сводится к нахождению такой функции

$$g(c^1, c^2, \dots, c^k, t), \quad (1)$$

где c^j – доля содержания в сплаве j -го химического элемента, t – температура, которой соответствуют предсказываемые значения жаропрочности

$$\hat{y}_i = g(c_i^1, c_i^2, \dots, c_i^k, t_i) \quad (2)$$

являются наиболее близкими к фактической жаропрочности y_i .

Для оценки качества предсказаний используются следующие показатели:

Стандартное отклонение предсказания:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}. \quad (3)$$

Средняя относительная ошибка:

$$\delta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|. \quad (4)$$

Требуется на основе исходного множества сплавов при помощи нейронных сетей спрогнозировать жаропрочность для сплава с заданными долями легирующих элементов при заданной температуре.

ВЫБОР МЕТОДА ОБУЧЕНИЯ ПОЛНОСВЯЗНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

В данной работе использована квадратичная функция потерь:

$$\text{loss} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (5)$$

Эта функция дифференцируема на всей области определения и симметрична, ее часто используют в регрессионном анализе при решении других задач [6].

а) Общий градиентный спуск.

Данный алгоритм позволяет рассчитать наиболее стабильный градиент, также в данных меньше шума.

Недостатком алгоритма является слишком высокая вычислительная сложность,

в связи с чем может потребоваться больше памяти [7].

б) Стохастический градиентный спуск.

Данный алгоритм отличается от градиентного спуска тем, что «дает» шаги по одному элементу из обучающей выборки, что позволяет ускорить процесс обучения нейронной сети и снизить ресурсы вычислительной системы.

Нейронная сеть обучается данным методом не столь быстро, как в случае использования адаптивных методов.

Существуют также методы (например, momentum, [8]) позволяющие за счет накопления импульса ускорить работу стохастического градиентного спуска.

в) Адаптивные методы.

К адаптивным методам относятся Adam, RMSprop и AdaGrad. Все они основаны на стохастическом градиентном спуске и отличаются подстройкой скорости обучения в зависимости от обучающей выборки.

С одной стороны считается, что они работают лучше, чем стохастический градиентный спуск. С другой стороны, есть ряд исследований, показывающих, что эти методы хуже обобщают зависимости в данных [9].

Таким образом, в связи со всем вышесказанным, для дальнейшей реализации был выбран алгоритм стохастического градиентного спуска. В принципе, изменение используемого алгоритма обучения происходит легко, благодаря использованию средства Tensorflow Keras, более подробно о котором говорится ниже.

ОПИСАНИЕ СРЕДСТВ РЕАЛИЗАЦИИ

Для реализации нейронной сети был выбран Tensorflow – фреймворк для машинного обучения, разработанный компанией Google. Является наиболее популярным фреймворком для машинного обучения, Tensorflow имеет множество руководств и

удобное средство для визуализации Tensorboard.

Недостатком данного фреймворка является высокий порог вхождения для начинающих пользователей. С другой стороны, в данный фреймворк входит высокоуровневая библиотека Keras, которая значительно ускоряет и облегчает создание простых нейронных сетей и не требует от пользователя глубоких знаний машинного обучения [10].

Язык Python является основным при работе с Tensorflow и хотя Tensorflow поддерживает ряд других языков, таких как C#, C++, Java, Haskell, Go и др., документация фреймворка для этих языков программирования неполна и не поддерживает часть его функциональности. Поэтому для реализации был выбран язык Python, а вместо стандартной среды был использован Jupyter Notebook, облегчающий процесс использования Python в машинном обучении [9–11].

ПРЕДОБРАБОТКА ИСХОДНЫХ ДАННЫХ

До обучения нейронной сети требуется провести ряд действий.

а) Нормализация исходных данных.

Нормализация данных – приведение набора данных к некоторой канонической форме.

В данном случае нормализация производится по следующей формуле:

$$a'_i = \frac{a_i - M(a)}{\sigma(a)}, \quad (6)$$

где a'_i – нормализованное значение i -го наблюдения некоторого параметра a ; a_i – ненормализованное значение i -го наблюдения; $M(a)$ – математическое ожидание параметра a ; $\sigma(a)$ – стандартное отклонение параметра a .

Операция нормализации применяется ко всем долям химических элементов, содержащихся в сплаве, а также к значениям температуры и жаропрочности. Полученные в процессе нормализации математические ожидания и стандартные отклонения каждой величины запоминаются для дальнейшего использования.

В дальнейшем, все операции по обучению нейронной сети будут происходить с использованием нормализованных дан-

ных. Операции же по оценке качества предсказаний будут происходить с использованием ненормализованного значения жаропрочности.

Поскольку в результате обучения нейронной сети по нормализованным данным, она будет предсказывать нормализованную жаропрочность, которую можно перевести в ненормализованную жаропрочность по формуле:

$$\hat{y}_i = \hat{y}'_i * \sigma(y) + M(y), \quad (7)$$

где \hat{y}'_i – нормализованное предсказанное значение жаропрочности.

б) Разделение имеющейся выборки на обучающую и тестовую.

Точность предсказаний обученной нейронной сети будем оценивать по некоторому тестовому набору данных.

При этом необходимо, чтобы тестовый набор данных не пересекался с обучающим. В противном случае в процессе оценки точности предсказания будет происходить переоценка точности.

В связи с этим, логично разделить имеющуюся исходную выборку на две непересекающиеся подвыборки: обучающая выборка (80 % исходной выборки) и тестовая (20 % исходной выборки).

Существует множество способов такого разделения, в данном же случае разобьем исходную выборку на обучающую и тестовую случайным образом.

СОЗДАНИЕ, ОБУЧЕНИЕ И ТЕСТИРОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Для повышения точности предсказаний было принято решение составить несколько нейронных сетей, различающихся по параметрам, затем независимо друг от друга провести их обучение на обучающей выборке и сравнить точность предсказаний на тестовой выборке.

а) Архитектура нейросетей.

Для построения было выбрано 6 вариантов архитектур нейронных сетей, различающихся по числу нейронов в скрытых слоях, числу скрытых слоев и функции активации нейронов:

Модель 1 – нейронная сеть с 2 скрытыми полностью связанными слоями, каждый слой кото-

рой имеет по 128 нейронов, а в качестве функции активации используется ReLU.

Модель 2 – нейронная сеть с 2 скрытыми полносвязными слоями, в которой каждый скрытый слой имеет вдвое большее количество нейронов, т.е. по 256 нейронов, в качестве функции активации используется ReLU.

Модель 3 – нейронная сеть с 2 скрытыми полносвязными слоями, в которой каждый скрытый слой имеет вдвое меньшее количество нейронов, т.е. по 64 нейронов, в качестве функции активации используется ReLU.

Модель 4 – нейронная сеть с увеличенным числом скрытых слоев, то есть с 3 скрытыми полносвязными слоями, в которой каждый скрытый слой имеет по 128 нейронов, в качестве функции активации используется ReLU.

Модель 5 – нейронная сеть с уменьшенным числом скрытых слоев, то есть с 1 скрытым полносвязным слоем, в которой каждый скрытый слой имеет по 128 нейронов, в качестве функции активации используется ReLU.

Модель 6 – нейронная сеть с 2 скрытыми полносвязными слоями, каждый слой которой имеет по 500 нейронов, а в качестве функции активации используется softmax.

б) Тестирование и сравнение моделей.

После реализации и обучения описанных ранее архитектур нейронных сетей было проведено их тестирование на тестовой выборке. Результаты тестирования представлены на рис. 1 и 2.

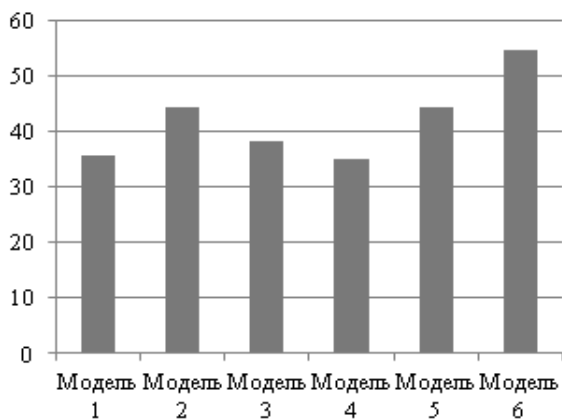


Рис. 1. Стандартное отклонение моделей

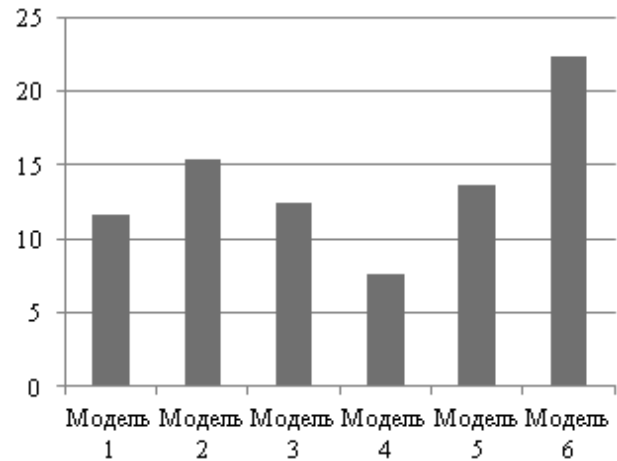


Рис. 2. Средняя относительная ошибка моделей в %

Как видно, стандартные отклонения моделей 1 и 4 довольно близки друг к другу, модель 6 – показывает себя хуже остальных.

При сравнении по относительной ошибке, лучше всего показала себя модель 4. Модель 6 показала себя хуже и по данному показателю.

По обоим показателям модель 4 показала себя лучше всего. Это связано с ее большим числом скрытых слоев, в следствие чего модель имеет большие способности к обобщению и выявлению неявных зависимостей. В среднем ее относительная ошибка равна 7,5 %.

Модель 6 показала себя хуже по обоим показателям, вероятно, вследствие использования другой функции активации.

СОЗДАНИЕ АНСАМБЛЯ МОДЕЛЕЙ

Для дальнейшего повышения точности предсказаний был применен ансамбль моделей нейронных сетей.

Ансамбль моделей – совместное использование нескольких моделей нейронных сетей для достижения лучшей точности прогнозирования, чем возможно получить по каждому из методов в отдельности.

В данной работе создание ансамбля использовалось для уменьшения стандартного отклонения моделей на тестовой выборке, в связи с чем, средняя относительная ошибка только упала.

а) *Используемые методы создания ансамбля моделей нейронных сетей.*

В работе использовались два подхода к построению ансамблей моделей – ансамбль, полученный с помощью метода наименьших квадратов и ансамбль, созданный с помощью новой нейронной сети. Рассмотрим их подробнее:

Ансамбль посредством метода наименьших квадратов (МНК). Пусть предсказанное ансамблем значение определяется по формуле

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^6 b_i * \hat{y}_i, \quad (8)$$

где \hat{y}_i – значение, предсказанное i -ой моделью; b_i – неизвестный весовой коэффициент модели i .

Тогда для создания ансамбля достаточно найти неизвестные коэффициенты b_i

Для нахождения этих коэффициентов на основе обучающей выборки достаточно минимизировать следующее выражение

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \sum_{j=1}^6 \hat{y}_{ij} b_j)^2, \quad (9)$$

где y_i – известное значение жаропрочности i -ой записи обучающей выборки; \hat{y}_{ij} – значение жаропрочности, предсказанное для i -ой записи j -ой нейронной сетью.

Для минимизации уравнения (9) можно воспользоваться множеством средств, в данном случае была использована библиотека `scipy` для Python.

Ансамбль посредством новой нейронной сети. В данном случае предполагается со-

здать новую нейронную сеть, которая будет состоять из шести уже обученных нейронных сетей, а также нескольких полносвязных слоев для вычисления жаропрочности на основе уже предсказанных нейросетями значений. После создания эту нейронную сеть требуется обучить, используя данные обучающей выборки.

К сожалению, библиотека `Tensorflow Keras` не дает возможности зафиксировать отдельные модели в данной нейронной сети, в связи с чем, модели 1–6 в будучи в ее составе заново начнут обучаться, что может привести не к очень хорошим результатам.

Схема ансамбля на основе новой нейронной сети представлена на рис. 3, где в нижних трех блоках указаны количество выходных нейронов очередного полносвязного слоя нейросети и соответствующие функции активации.

б) *Оценка точности ансамблей.*

Для полученных ансамблей была проведена проверка точности. Стандартное отклонение и средняя относительная ошибка представлены на рис. 4 и 5 (для сравнения приведены также значения для моделей 1 и 4).

Как видно, ансамбль на основе МНК показал себя лучше по стандартному отклонению, чем отдельно взятые модели. При использовании ансамбля посредством новой нейронной сети, стандартное отклонение только увеличилось. Это можно объяснить тем, что отдельно взятые обученные модели, включенные в этот ансамбль, при обучении в совокупности продолжают обучаться.

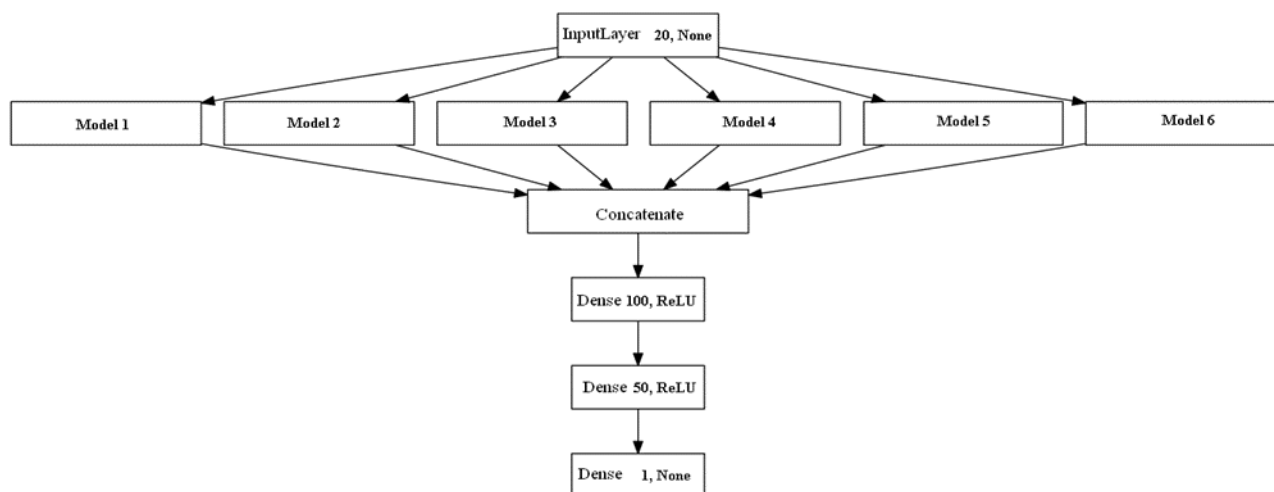


Рис. 3. Схема ансамбля посредством новой нейронной сети

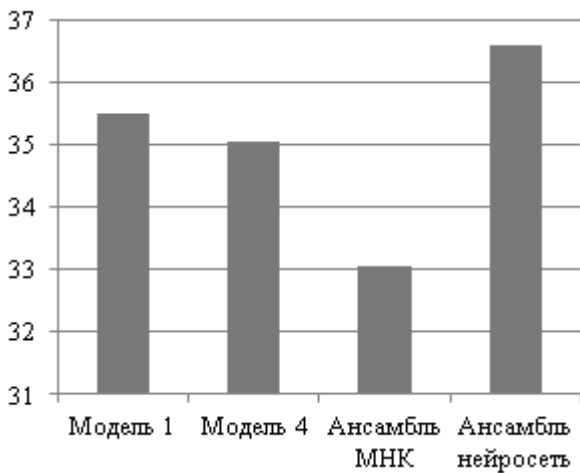


Рис. 4. Стандартное отклонение моделей и ансамблей моделей нейронных сетей

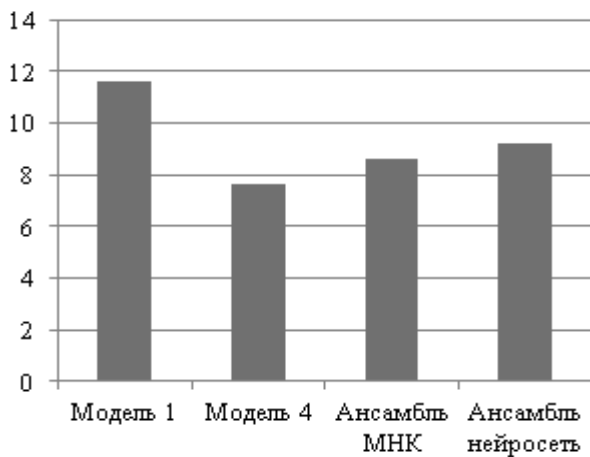


Рис. 5. Средняя относительная ошибка моделей и ансамблей моделей нейронных сетей

Исправить данный недостаток можно, перейдя от высокоуровневого фреймворка Tensorflow Keras к более низкоуровневому – Tensorflow, однако этот вопрос не рассматривается в данной работе.

В том, что относительная ошибка у ансамблей выше, чем у модели 4, нет ничего удивительного, поскольку при их построении производилась попытка минимизировать стандартное отклонение, а относительная ошибка игнорировалась. В случаях же, когда минимизация относительной ошибки является приоритетнее, ансамбли строятся аналогично.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЖАРОПРОЧНОСТИ ДЛЯ КОНКРЕТНЫХ СПЛАВОВ И ДЕМОНСТРАЦИЯ РАБОТЫ ПРОГРАММЫ

В табл. 1 представлено 3 случайных сплава из тестовой выборки (процентное

содержание химических элементов, составляющих эти сплавы, приведены в левом столбце), а также реальные и предсказанные моделями 1, 4 и ансамблями моделей значения жаропрочности этих сплавов при заданной температуре. Как видно, все модели и ансамбли неплохо справились со сплавами 1 и 3, однако все они очень сильно (примерно на 35 %) переоценивают жаропрочность сплава 2.

Таблица 1

Предсказанные значения жаропрочности для 3-х сплавов

	Сплав 1	Сплав 2	Сплав 3
C, %	0,15	0,11	0
Cr, %	8	5,5	2
Co, %	10	9,4	3
Mo, %	0,7	0,9	0,4
W, %	10	12	5
Ti, %	1	1	0,2
Al, %	5,5	5,3	5,7
Nb, %	0	1,6	0,1
Ta, %	3	0	8
B, %	0,015	0	0
Zr, %	0,05	0	0
Hf, %	1,5	0	0,15
V, %	0	0,9	0
Re, %	0	0	6
Ni, %	60,085	63,29	69,45
Температура, С	850	750	1093
Значение жаропрочности, МПа	559	535	175
Предсказание модели 1	521,6	720,46	184,13
Относительная ошибка модели 1, %	6,69	34,67	5,22
Предсказание модели 4	505,76	725,4	166,93
Относительная ошибка модели 4, %	9,52	35,59	4,61
Предсказание ансамбля MNK	516,23	723,88	175,96
Относительная ошибка ансамбля MNK, %	7,65	35,30	0,55
Предсказание ансамбля нейросетью	493,94	729,82	180,58
Относительная ошибка ансамбля нейросетью %	11,64	36,41	3,19

На рис. 6 представлен фрагмент программы, демонстрирующий процесс предсказания жаропрочности для сплава 1.

При запуске программы пользователю предлагается ввести доли элементов сплава в процентах. Если данный элемент отсутствует в сплаве, то стоит ввести 0.

```
(tf) ~/diplom$ python output.py
Enter metal's structure(in percents for each element):
C: 0.15
Cr: 8
Co: 10
Mo: 0.7
W: 10
Ti: 1
Al: 5.5
Nb: 0
Ta: 3
B: 0.015
Zr: 0.05
Hf: 1.5
V: 0
Re: 0
Ru: 0
Ir: 0
Ni: 60.085
temperature: 850
Predicted by model 1: 521.6041870117188
Predicted by model 2: 509.0759582519531
Predicted by model 3: 519.1522216796875
Predicted by model 4: 505.76416015625
Predicted by model 5: 499.1940612792969
Predicted by model 6: 528.291259765625
Predicted by least squares ensemble: 517.7993966178922
Predicted by new neural network ensemble: 493.94788
```

Рис. 6. Предсказание жаропрочности для сплава 1

Далее пользователю предлагается ввести температуру в градусах Цельсия. В течение 5–10 секунд происходят все требуемые вычисления и выводятся результаты предсказаний всеми моделями 1–6 и обоими ансамблями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанное программное обеспечение позволило провести ряд численных экспериментов, которые продемонстрировали резервы повышения жаропрочности существующих сплавов, а также на основе созданного ряда нейронных сетей, способных по составу сплавов предсказывать жаропрочность при заданной температуре, показали возможность применения такого подхода для проектирования новых сплавов на никелевой основе.

Для улучшения точности предсказания жаропрочности были рассмотрены два подхода к созданию ансамбля нейронных сетей, один из которых показал существенное увеличение точности предсказания значений жаропрочности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sims C. T., Stoloff N. S., Hagel W. C. *Superalloys II: High-Temperature Materials for Aerospace and Industrial Power*. 2nd Edition. New York: John Wiley & Sons Inc., 1987. 640 p.
2. Нургаянова О. С. Автоматизированное проектирование литейных жаропрочных никелевых сплавов на основе методов искусственного интеллекта: дис. ... канд. техн. наук: 05.13.12. Уфа, 2006. 152 с.: ил. [O. S. Nurgayanova, *Computer-aided design of cast heat-resistant nickel alloys based on artificial intelligence methods*: Cand. Diss. Abstr., (in Russian). Ufa, 2006.]
3. Трунин В. Ф. Разработка жаропрочных сплавов на никелевой основе с рабочей температурой до 1300 С: дис. ... канд. техн. наук: 05.16.01. Москва, 2007. 211 с. [V. F. Trunin, *Development of heat-resistant nickel-based alloys with operating temperatures up to 1300 C*, Cand. Diss. Abstr., (in Russian). Moscow, 2007.]
4. Нургаянова О. С. Применение искусственных нейронных сетей в задачах классификации многокомпонентных сплавов // Труды VI Всероссийской научной конференции «Информационные технологии интеллектуальной поддержки принятия решений», (Уфа–Ставрополь, Май 28–31 2018). Уфа: УГАТУ, 2018. Т. 3. С. 21–26. [O. S. Nurgayanova, "Application of artificial neural networks in the problems of classification of multicomponent alloys", (in Russian), in *Proceedings of the 6th All-Russian Scientific Conference "Information Technologies for Intelligent Decision Making Support"*, 2018, vol. 3, pp. 21-26.]
5. Cybenko G. Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function // *Mathematics of Control, Signals and Systems*. 1989. Vol. 2, Iss. 4. Pp. 303-314.
6. Jasbir Singh Arora. *Introduction to Optimum Design*. Moscow: Academic Press, 2017. 968 p.
7. Гасников А. В. Современные численные методы оптимизации. Универсальный градиентный спуск. М.: МФТИ, 2018. 286 с.: ил. [A. V. Gasnikov, *Modern numerical optimization methods. Universal gradient descent*, (in Russian). Moscow: MFTI, 2018.]
8. Micol Marchetti-Bowick. *Convex Optimisation Lecture 6*. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.stat.cmu.edu/~ryantibs/convexopt-F13/scribes/lec6.pdf> (дата обращения 4.05.2021). [Micol Marchetti-Bowick (2021, May 04), "Convex Optimisation Lecture 6". [Online]. Available: <https://www.stat.cmu.edu/~ryantibs/convexopt-F13/scribes/lec6.pdf>]
9. The Marginal Value of Adaptive Gradient Methods in Machine Learning / A. C. Wilson, et al. // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2017. Pp. 4148-4158.
10. Mateusz Opala. *Deep Learning Frameworks Comparison – Tensorflow, PyTorch, Keras, MXNet, The Microsoft Cognitive Toolkit, Caffe, Deeplearning4j, Chainer*. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.netguru.com/blog/deep-learning-frameworks-comparison> (дата обращения 4.05.2021) [Mateusz Opala (2021, May 4), "Deep Learning Frameworks Comparison – Tensorflow, PyTorch, Keras, MXNet, The Microsoft Cognitive Toolkit, Caffe, Deeplearning4j, Chainer". [Online]. Available: <https://www.netguru.com/blog/deep-learning-frameworks-comparison>]
11. Project Jupyter. [Электронный ресурс]. URL: <https://jupyter.org/> (дата обращения 4.05.2021). [Project Jupyter (2021, May 4). [Online]. Available: <https://jupyter.org/>]

ОБ АВТОРАХ

ЮСУПОВА Нафиса Исламовна, проф. каф. ВМик ФГБОУ ВО УГАТУ. Дипл. радиопизик (Воронежск. гос. ун-т, 1975). Д-р техн. наук по упр. в техн. системах (УГАТУ, 1995). Иссл. в обл. иерархических моделей и ситуационного управления.

НУРГАЯНОВА Ольга Сергеевна, доц. каф. ВМик ФГБОУ ВО УГАТУ. Дипл. инженер (УГАТУ, 2003). Канд. техн. наук по системам автоматизированного проектирования по отраслям (УГАТУ, 2006). Иссл. в обл. применения искусственных нейронных сетей в различных областях.

ФАРРАХОВ Рамазан Аксанович, программист. Дипл. бакалавр (УГАТУ, 2020).

METADATA

Title: On the organization of architectures and algorithms for training neural networks for prediction of the heat resistance of multicomponent alloys.

Authors: N. I. Yusupova¹, O. S. Nurgayanova², R. A. Farrakhov³

Affiliation: Ufa State Aviation Technical University (UGATU), Russia.

Email: ¹ yussupova@ugatu.ac.ru, ² onurgayanova@yandex.ru, ³ framaz@yandex.ru

Language: Russian.

Source: SIIT (scientific journal of Ufa State Aviation Technical University), vol. 3, no. 3 (7), pp. 37-44, 2021. ISSN 2686-7044 (Online), ISSN 2658-5014 (Print).

Abstract: Methods for predicting the heat-resistance of nickel alloys using fully connected neural networks (multilayer perceptrons) and an ensemble of models is discussed. A detailed description of the methods used for training and testing of networks and ensemble of models is given. Special attention is paid to approaches that improve the accuracy of predictions. An idea of the implementation of the algorithms used using the Tensorflow and Tensorflow Keras frameworks is given. In conclusion, a comparison of the results of the operation of neural networks for various superalloys is given.

Key words: artificial neural networks; ensembles of models; fully connected neural network; learning algorithm; heat-resistant nickel alloys; predicting properties; Tensorflow; Keras; Python.

About authors:

YUSUPOVA, Nafisa Islamovna, Prof., Dept. of Computational Mathematics and Robotics. Dipl. Radiophysicist (Voronezh State Univ., 1975). Dr. of Tech. Sci. (USATU, 1998).

NURGAYANOVA, Olga Sergeevna, Assoc. Prof., Dept. of Computational Mathematics and Cybernetics. Dipl. Economist Mathematician (USATU, 2006). Cand. of Tech. Sci. (USATU, 2006).

FARRAKHOV, Ramazan Acsanovich, programmer. Dipl. bachelor (USATU, 2020).