

SECTION XIX. COMPUTER AND SOFTWARE ENGINEERING

DOI 10.36074/logos-23.06.2023.33

ЕКСТРАПОЛЯЦІЯ ЗАЛЕЖНОСТІ ВМІСТУ ЗАЛІЗА ВІД ПИТОМОЇ ВАГИ ПРОБИ З ВИКОРИСТАННЯМ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ

Комаров Сергій Іванович

магістр факультету інформаційних технологій
Криворізький національний університет

Крапивний Микита Сергійович

магістр факультету інформаційних технологій
Криворізький національний університет

НАУКОВИЙ КЕРІВНИК:

Азарян Альберт Арамаісович

доктор технічних наук, професор
Криворізький національний університет

УКРАЇНА

Мета дослідження. Розширення діапазону прогнозування якості мінеральної сировини з застосуванням нейронних мереж та штучного інтелекту.

Практична значимість. Даний метод дозволить скоротити час аналізу проб, знизити вартість, підвищити продуктивність праці та економічну ефективність видобутку залізної руди.

Формування проблеми. При відборі представницьких проб гірської породи для отримання еталонної залежності вмісту корисного компонента від питомої ваги проби існують певні обмеження, пов'язані з реалізацією цього технологічного процесу. У таких випадках ефективним рішенням є використання екстраполяції в поєднанні з нейронними мережами та штучним інтелектом – нейронні мережі можуть автоматично виявляти закономірності в даних та прогнозувати значення вмісту заліза на основі питомої ваги проби.

Аналіз досліджень і публікацій. За останні роки було проведено кілька досліджень, де інформаційні технології і штучний інтелект застосовувалися для екстраполяції залежностей в різних галузях. Так, в роботі [1] розглянуто чинники, що впливають на точність визначення вмісту корисного компонента. Інші дослідники використовували нейронні мережі для прогнозування вмісту речовин у пробах ґрунту, а також для екстраполяції вмісту металів у водних розчинах [2]. Ряд статей і досліджень зосереджуються на різних методах екстраполяції та використанні штучного інтелекту для аналізу та передбачення вмісту речовин [3]. Наприклад, роботи, які досліджують різні алгоритми навчання нейронних мереж, або ті, які порівнюють ефективність різних моделей екстраполяції [4]. Ці роботи доводять перспективи використання штучного інтелекту для точного прогнозування залежностей.

Постановка задачі. Оптимізація собівартості контролю якості руд чорних металів шляхом зниження вартості аналізу та забезпечення більш ефективного використання обладнання з допомогою зменшення витрати на непотрібну обробку низькоякісної руди.

Представлення основного матеріалу дослідження. Вхідні дані під час проведення дослідження отримано з використанням гравітаційного методу [5]. Цей метод є опосередкованим способом контролю якості мінеральної сировини. Для визначення його застосовності в гірничодобувній та переробній промисловості проводиться відбір представницьких проб у родовищі, де планується використовувати дані пристрої. Загальний вигляд функціональної схеми даного методу представлено на (рис. 1).

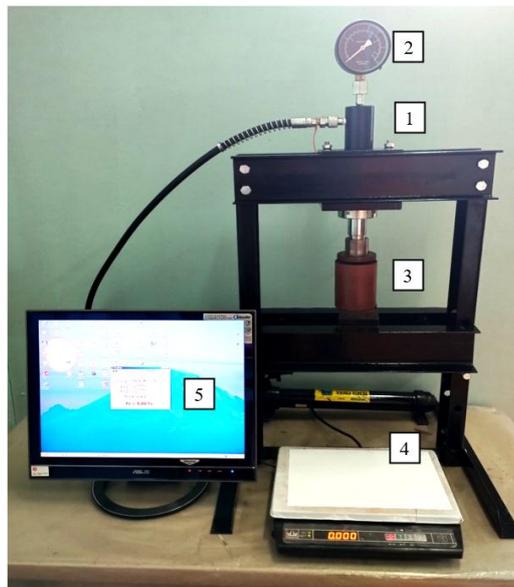


Рис. 1. Загальний вигляд функціональної схеми

Представницькі проби послідовно заповнюють кювету 3, ущільнюють за допомогою гідравлічного пресу 1 під навантаженням 2 тони (за показниками манометра 2), та зважують на точних електронних вагах 4. Після статистичної обробки отриманих результатів проведеного дослідження формуються еталонні залежності між вхідними Q та вихідними даними Fe . Далі, ці зразкові залежності записуються в пам'ять комп'ютера, розробляється відповідне програмне забезпечення, проводяться його тестування, і пристрій стає готовим до роботи.

Алгоритм розробки моделі прогнозування включає кроки збирання, аналізу та обробки даних залежності ваги лабораторної проби від вмісту заліза. Далі необхідно обрати і побудувати математичну і програмну модель, яка найкраще підходить для опису залежності. Це може бути поліноміальна регресія, неймережа, або інша модель, в залежності від характеру даних та поставленої задачі. Також необхідно обрати функцію втрат, яка вимірює різницю між прогнозованими і спостережуваними значеннями. Потім використовуючи обрану модель, виконати навчання та прогнозування нових даних і, наостанок, провести оцінку якості моделі та її здатності до екстраполяції. Це може включати розрахунок метрик, таких як середня квадратична помилка (MSE), середня абсолютна помилка (MAE) або коефіцієнт детермінації (R^2) й порівняння прогнозованих значень з фактичними та аналіз відхилень [6]. На (рис. 2) наведено загальний алгоритм розробки такої моделі.

Оскільки необхідно виконати прогнозування неперервної величини відсотку вмісту заліза Fe в залежності від ваги проби Q , то це є задачею регресії. Задача регресії відноситься до прогнозування або моделювання неперервної залежності між вхідними (незалежними) змінними і вихідними (залежними) змінними. Моделі регресії можуть мати різну складність, від простих лінійних моделей до складних нейронних мереж [7].

Поліноміальна регресія – використовує апроксимацію для моделювання залежностей, які можуть бути виражені поліноміальними функціями. Методи найменших квадратів або інші алгоритми апроксимації використовуються для знаходження оптимальної поліноміальної кривої, яка прогнозує дані [6].

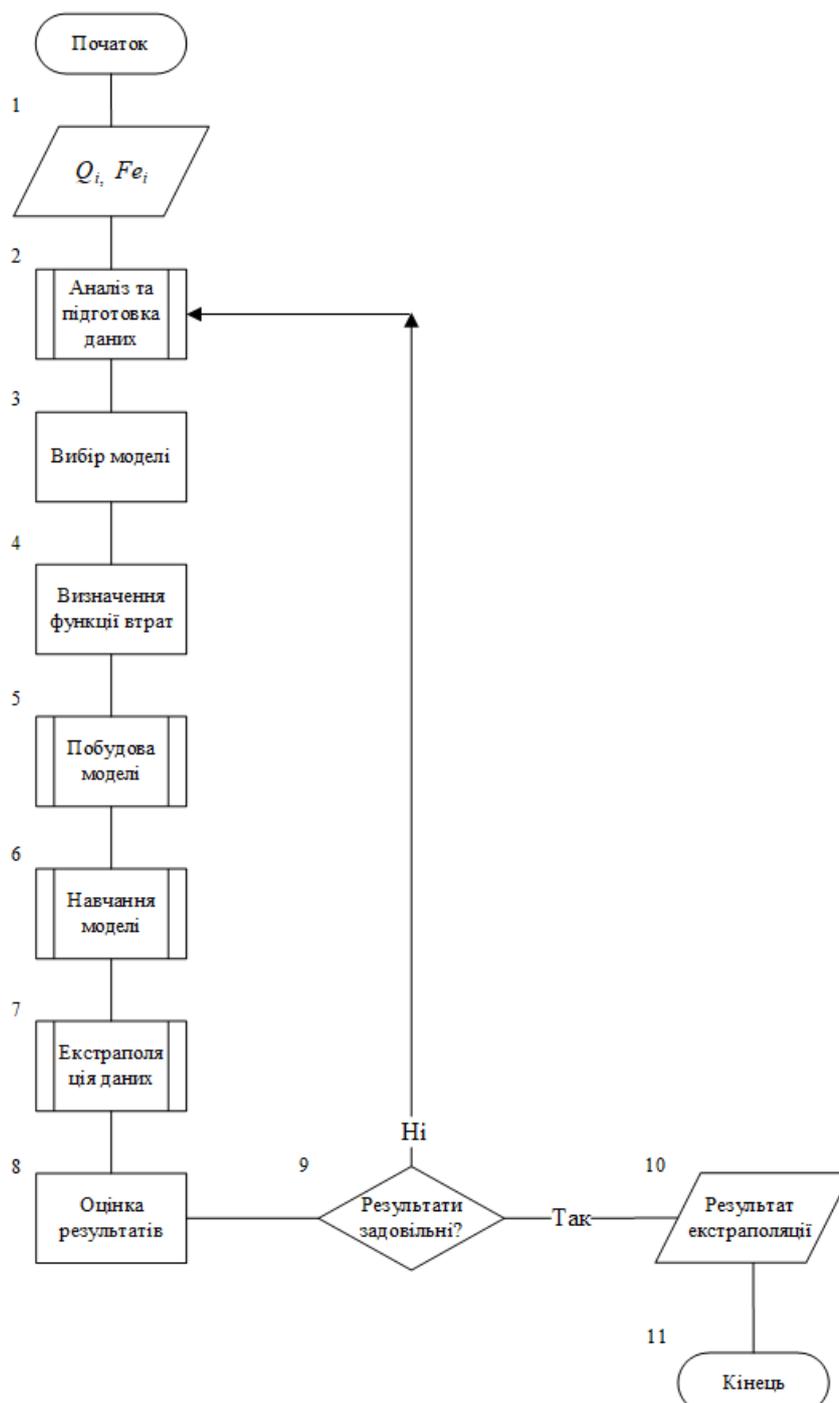


Рис. 2. Алгоритм розробки моделі екстраполяції

Нейронні мережі також можуть бути використані для екстраполяції даних. Вони здатні до навчання складних залежностей і можуть знаходити закономірності в даних. Нейромережі складаються зі штучних нейронів та зв'язків між ними. Кожен нейрон приймає вхідні сигнали, обчислює їх зважену суму та застосовує активаційну функцію до цієї суми. Нейрони організовані в шари, інформація передається від вхідного шару до вихідного шару через приховані. Кожен нейрон у вихідному шарі видає прогнозоване значення.

Для виконання екстраполяції за допомогою нейронних мереж спочатку потрібно навчити модель на наявних даних і потім використати її для передбачення значень за межами цих даних. Під час навчання, нейромережа вивчає тенденцію та формує функцію, яка відображає залежність даних. Це досягається шляхом використання оптимізаційного алгоритму градієнтного спуску – ключового кроку у навчанні нейромережі. Градієнтна оптимізація базується на ідеї, що змінюючи значення параметрів моделі в напрямку, протилежному до збільшення градієнту функції втрати, можна досягти зменшення її значення і, отже, покращити прогностичну здатність моделі [8].

Аналіз даних перед розробкою прогнозу моделі штучного інтелекту, дозволяє оцінити типи залежностей даних, отримати відомості щодо розподілу, пропущених значень, викидів. Аналіз розподілу і визначення характеру залежності вмісту заліза від ваги проби виконано з використанням `pairplot` бібліотеки `Seaborn` у `Python`. Візуалізацію вмісту заліза Fe від ваги проби Q показано на (рис. 3).

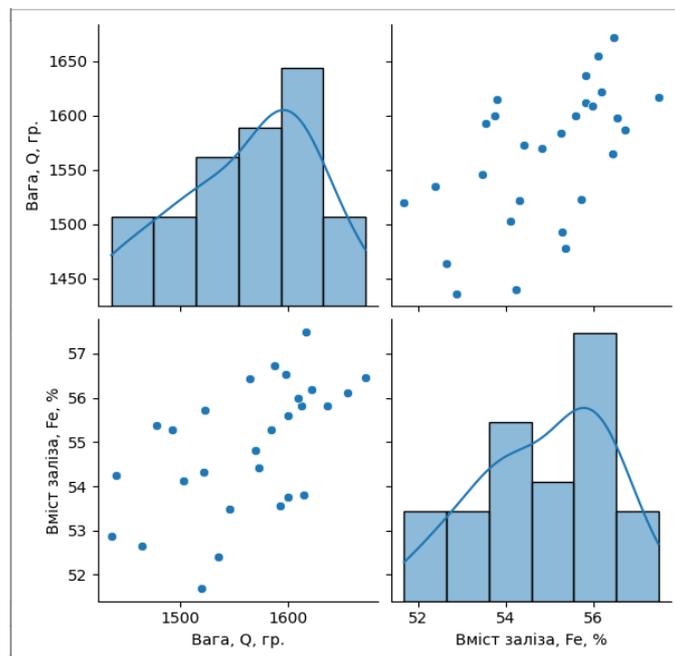


Рис. 3. Аналіз експериментальних даних

З графіків видно, що значення ваги Q і відсотку вмісту заліза Fe мають нормальний розподіл. Вхідні дані мають деякий шум, який спричинений не ідеальними умовами проведення лабораторного дослідження, але загальну тенденцію встановити все ще можливо. Щодо характеру залежності вмісту заліза від ваги проби, – вона має лінійний або поліноміальний характер другого ступеня – з ростом ваги Q , збільшується і відсоток вмісту заліза Fe .

Оскільки нейромережі є чутливими до шумів і викидів в даних, спочатку необхідно позбавитися від них. Для виявлення та видалення викидів у даних

використовується метод опорних векторів (Support Vector Machines, SVM). Основна ідея цього методу полягає в побудові оптимальної гіперплощини, яка розділяє дані різних класів. Використовуючи SVM для виявлення викидів, можна розглядати кожен зразок даних як окремий клас і намагатись знайти гіперплощину, яка найкраще відділяє цей зразок від інших [9]. Форму гіперплощини визначає тип ядра. Обрано поліноміальний тип ядра SVM і допустиме відхилення від гіперплощини на рівні 1%, – опорний вектор буде побудовано у формі поліноміальної кривої і матиме розкид 1%, – зразки вмісту заліза з більшим ніж на 1% відхиленням від оптимального поліному буде відкинуто. Візуалізацію показано на (рис 4).

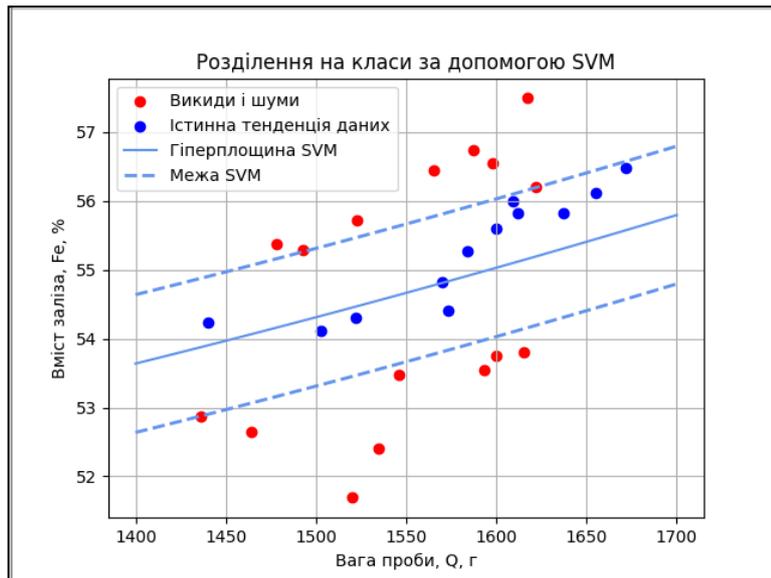


Рис. 4. Виявлення аномальних даних лабораторних проб

Позначені червоним кольором дані є шумами (викидами) і тому їх не було використано при навчанні нейронної мережі.

Для прогнозування залежності вмісту заліза за допомогою нейронної мережі, використано архітектуру мережі прямого поширення з одним вхідним, одним прихованим та одним вихідним шаром. Кількість нейронів підібрано експериментальним чином – відповідно до оцінки R^2 . Архітектуру мережі наведено на (рис. 5).

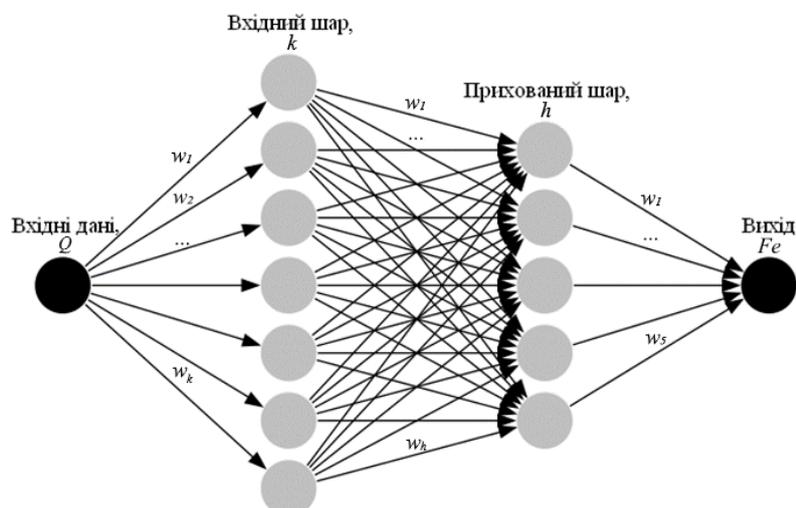


Рис 5. Нейронна мережа екстраполяції вмісту заліза

Математична модель цієї нейромережі прямого поширення з одним вхідним, одним прихованим і вихідним шаром може бути описана так:

- Q є вхідним вектором розмірності 1 (Q_1), який є величиною ваги проби;
- k є вхідним шаром розмірності 7 (k_1, k_2, \dots, k_7);
- h є вектором прихованого шару розмірності 5 (h_1, h_2, \dots, h_5);
- Fe є вихідним значенням вмісту відсотку заліза.

Зв'язки між шарами:

– нейрони вхідного шару k_i обчислюються зваженим сумуванням вхідних значень з вагами w_i і застосуванням функції активації $g()$: $k_i = g(w_i Q_1)$;

– з вхідного шару до прихованого шару: кожен нейрон прихованого шару h_j обчислюється шляхом зваженого сумування вхідних нейронів k з вагами w_{ij} і застосування активаційної функції $g()$: $h_j = g(w_{j1}k_1 + w_{j2}k_2 + \dots + w_{j7}k_7)$;

– з прихованого шару до вихідного шару: вихідне значення Fe обчислюється шляхом зваженого сумування значень прихованих нейронів h з вагами w :

$$Fe = w_1 h_1 + w_2 h_2 + \dots + w_5 h_5.$$

Узагальнено, нейромережу прямого поширення з такою архітектурою можна математично описати як функцію, яка здійснює перетворення вхідного значення Q (вага проби) шляхом послідовного застосування зважених сум і активаційних функцій для обчислення вихідного значення відсотку вмісту заліза Fe : $Fe = f(Q; \theta)$, де θ позначає параметри моделі, тобто ваги вхідних синапсів нейронів. У даному випадку, функцію $f(Q; \theta)$ можна представити як (1).

$$Fe = f(Q; \theta) = \sum_{i=1}^5 w_i g(\sum_{h=1}^7 w_{ih} g(w_{hk} Q_1)) \quad (1)$$

У якості функції активації нейронів $g()$ експериментальним чином обрано *softplus*. Ця функція є нелінійною і повертає значення, що знаходяться в межах від 0 до плюс нескінченності. Вона має властивість плавно збільшувати значення з ростом вхідного сигналу (2).

$$\text{softplus} = \log(1 + e^x) \quad (2)$$

У якості функції втрат та метрики для оцінки точності прогнозування моделі при навчанні нейронної мережі використовую абсолютну середню помилку – *MAE*. Вона вимірює середнє абсолютне значення різниці між прогнозованими і спостережуваними значеннями (3).

$$MAE = (1 / n) \cdot \sum |y_i - \hat{y}_i| \quad (3)$$

MAE не зводить помилки до квадратів, тому вона краще відображає абсолютну величину помилки – особливо корисно, коли значення помилки мають прямий вплив на рішення та інтерпретацію результатів, як у випадку прогнозування відсотку вмісту заліза Fe в залежності від ваги проби Q .

Програмну модель реалізовано на Python з використанням спеціалізованої бібліотеки Keras для побудови нейромережі. Перед її навчанням виконано нормалізацію даних шляхом масштабування їх до діапазону $\{0, 1\}$.

Перевірку якості прогнозування виконано з допомогою коефіцієнту детермінації R^2 , що є мірою того, наскільки добре поліноміальна модель пояснює варіацію вихідних даних. Чим ближче значення R^2 до 1, тим краще модель пояснює дані:

$R^2 \text{ Score on Data: } 0.9747651148894703$

Отримане значення $R^2 = 0.9747$ свідчить про те, що дана модель майже ідеально пояснює залежність між вагою проби і вмістом заліза. Приблизно

97.47% варіації вихідних даних можна пояснити за допомогою цієї моделі. Графік екстраполяції залежності наведено на (рис. 6).

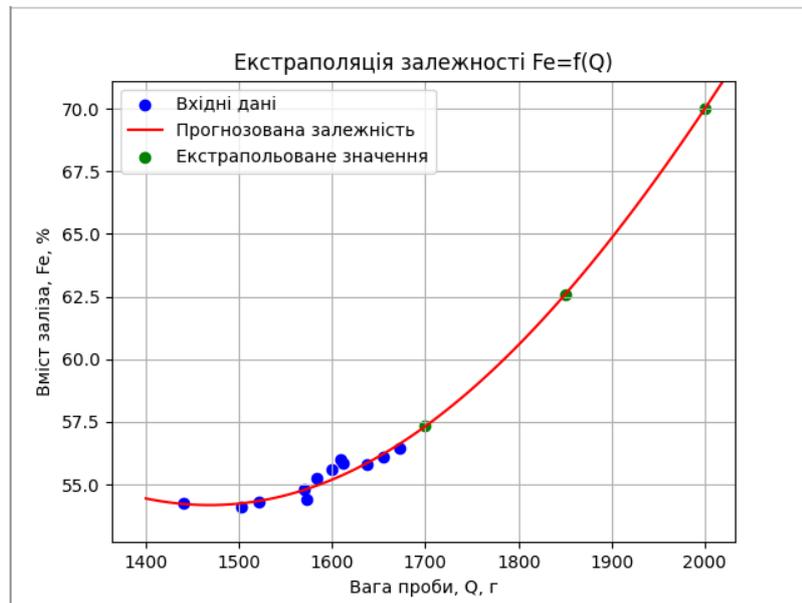


Рис. 6. Результат прогнозування з використанням нейронної мережі

Результати досліджень. Проведені в лабораторії дослідження показали, що розглянутий метод контролю заліза в гематитових рудах відповідає всім вимогам оперативного контролю і не поступається відомим геофізичним методам, таким як ядерно-фізичні, магнітометричні, ультразвукові, акустичні, радіометричні та інші, що залежать від фізико-механічних властивостей мінералів. У статті представлено блок-схему алгоритму роботи запропонованої системи та її докладний опис. Також наведені результати екстраполяції залежності вмісту заліза в гематитових рудах від питомої ваги, що дали можливість розширити діапазон прогнозування та вимоги до використання експрес-аналізу гематитових руд гравітаційним методом. В процесі дослідження розроблено спеціальне програмне забезпечення, яке забезпечує прогнозування в діапазоні від 60 до 70 відсотків вмісту заліза у гематитових рудах.

Висновки та напрямок подальших досліджень. Нейронні мережі є ефективним інструментом у моделюванні та прогнозуванні різноманітних залежностей. Аналіз даних – критичний етап у розробці моделі екстраполяції, він допоміг зрозуміти характеристики розподілу, аномалії й залежності в даних.

Порівняння якості розробленої моделі нейронної мережі прямого поширення для задачі екстраполяції відсотку вмісту заліза Fe за критерієм детермінації R^2 показало, що навчена на очищених від шумів і викидів даних нейронна мережа дала високу точність прогнозування.

Напрямок подальших досліджень може полягати в дослідженні використання інших методів прогнозування штучного інтелекту, таких як генетичні алгоритми, підсилене навчання або машинне навчання з вчителем – це дасть можливість порівняти різні методи та визначити найефективніший підхід для даної задачі. Також можна дослідити можливість використання більш складних моделей штучного інтелекту, таких як глибокі нейронні мережі з багатьма шарами, рекурентні нейронні мережі або комбінації різних архітектур. Це може дозволити покращити точність прогнозування та здатність до узагальнення моделі.

Список використаних джерел:

- [1] Азарян, А. А. & Гриценко, А. Н. (2016). Исследование экспресс-анализа содержания общего железа в руде с использованием гамма-излучения. *Вісник Криворізького національного університету*, (43), 79-84.
 - [2] Baum Z. J. (2021). Artificial intelligence in chemistry: current trends and future directions. *Journal of Chemical Information and Modeling*, (T61-7), 3197-3212.
 - [3] Merayo, D. & Rodríguez-Prieto, A. & Camacho, A. M. (2020). Prediction of physical and mechanical properties for metallic materials selection using data and artificial neural networks. *Institute of Electrical and Electronics Engineers*, (8), 13444-13456.
 - [4] Shi Z. (2019). Deep elastic strain engineering of bandgap through machine learning. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, (T116-10), 4117-4122.
 - [5] Азарян, А. А. & Крапивний, Н. С. (2023). Гравітаційний метод оперативного контролю вмісту заліза в подрібненій гірничій масі. *Вісник Криворізького національного університету*.
 - [6] Hastie T. (2009). *The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction*. New York: Springer International Publishing.
 - [7] Забуранна, Л. В. & Попрозман, Н. В. & Клименко, Н. А. & Попрозман, О. І. & Забуранний, С. В. (2014). *Оптимізаційні методи та моделі*. Київ.
 - [8] Bishop, C. M. & Nasrabadi, N. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*. New York: Springer International Publishing.
 - [9] Wolfgang E. (2017). *Introduction to Artificial Intelligence 2nd edition*. New York: Springer International Publishing.
-