

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАНОМАТЕРИАЛОВ

*Докт. техн. наук, проф., лауреат Государственной премии КОЛЕШКО В. М.¹⁾,
магистр техн. наук ВОРОБЕЙ Е. А.¹⁾,
канд. техн. наук ПРУДНИКОВА Е. Л.²⁾*

¹⁾ Белорусский национальный технический университет,

²⁾ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Развитие современной микронанотехнологии связано с решением различных задач, среди которых важное место занимает разработка высокоэффективных недорогих сенсорных и высокочувствительных микронаносистем широкого спектра назначения для контроля качества и прогнозирования свойств микронаноматериалов с целью обеспечения управляемого техпроцесса их изготовления. Для этих целей обычно проводится моделирование в сложных программных продуктах или используются дорогостоящие технологии для изучения структуры наноматериалов, таких как, например, просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ), растровая электронная микроскопия (РЭМ) или сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ). Важными недостатками данных методов являются невозможность их использования в реальном времени, непортативность и обязательное наличие высококвалифицированного и обученного персонала. Интеллектуальные системы находят в этой связи все более широкое применение как для анализа данных измерений, сенсорного контроля, так и для обобщения результатов научных исследований и создания новых аппаратно-программных систем с разумом [1].

Методика исследования. Разработанный авторами статьи «электронный глаз» (е-глаз) «ИСОН-4» в виде аппаратно-программной сенсорной системы с интеллектуальным программным обеспечением «ИСНМ» предназначен для исследования сенсорных свойств наноматериалов. Микросветодиоды испускают электромагнитные волны в широкополосном диапазоне 380–2400 нм, которые улавливаются микрофотодиодами для регистрации количественного изменения отраженного излучения. Оптические методы отличаются неинвазивностью и удобством практического применения.

Для исследования были использованы массивы трех типов многостенных вертикально ориентированных плотно упакованных массивов углеродных нанотрубок (УНТ), полученных высокотемпературным пиролизом п-ксилола (C_8H_{10}) в смеси с летучим источником катализатора роста ферроценом ($Fe(C_5H_5)_2$) с концентрацией ферроцена c_x в реакционной смеси для каждого из типов нанотрубок 1; 5 и 10 % соответственно. На рис. 1 показаны результаты ПЭМ с помощью JEM 100-CX JEOL, которые позволяют оценить размерные и структурные характеристики УНТ, выявить в них магнитные наночастицы железосодержащих фаз [2]. Сущность исследования заключалась в прогнозировании результатов ПЭМ с помощью разработанной интеллектуальной системы «ИСНМ» и е-глаза.

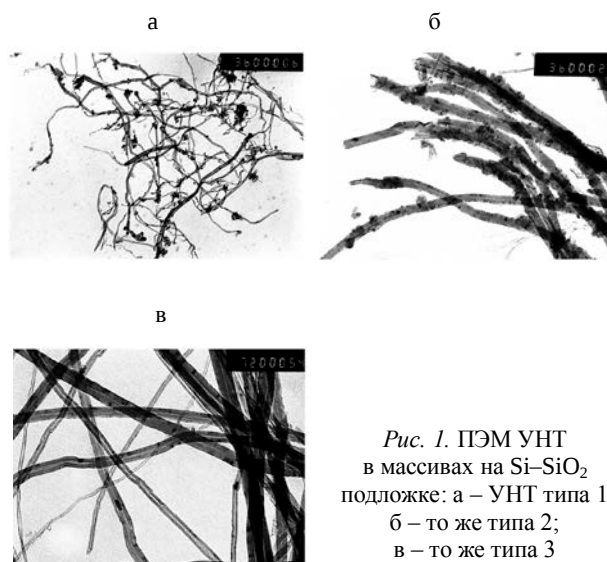


Рис. 1. ПЭМ УНТ в массивах на Si-SiO₂ подложке: а – УНТ типа 1; б – то же типа 2; в – то же типа 3

Результаты исследований. Разработанная авторами интеллектуальная система «ИСНМ» способна осуществлять прогнозирование информационные образы новых неизвестных

ей типов УНТ или других материалов по поступающим входным данным после самообучения на известных ей данных других типов с целью обнаружения самостоятельных классов информационных образов, которые в дальнейшем могут быть добавлены в целевую функцию при классификации. Для формирования информационных образов был использован анализ главных компонент для извлечения полезной информации из входных сенсорных данных коэффициентов отражения [3]. Для построения интеллектуальной системы «ИСНМ» на этапе обучения и прогнозирования была использована разработанная многокомпонентная гиперсферная интеллектуальная нейронная сеть (МГИНС), включающая сенсорный блок и технейроны, состоящие из смесителя, сумматора и преобразователя, с целью оптимизации производительности обучения. Сущность МГИНС заключается в поиске глобального максимума точности распознавания информационных образов УНТ в многомерном пространстве посредством разделяющих гиперсфер с многокомпонентными весовыми коэффициентами.

Для оценки качества функционирования «ИСНМ» было проведено многоядерное обучение с помощью МГИНС (рис. 2) на данных УНТ типов 1 и 3 (табл. 1) для прогнозирования свойств УНТ типа 2 (табл. 2). При этом структура МГИНС, представленная на рис. 2, имеет соответствующее пояснение в табл. 3.

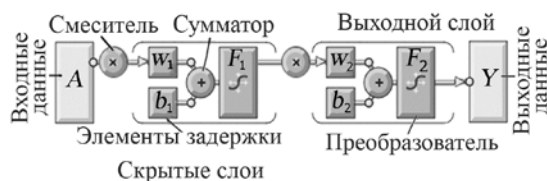


Рис. 2. Нейронная сеть для прогнозирования образов УНТ типа 2

Таблица 1

Результаты обучения МГИНС при правильном прогнозировании информационных образов УНТ

Интеллектуальная система	Точность обучения, %	Время обучения, с (2 ядра)
	УНТ типа 1 / УНТ типа 2	
МГИНС	100 (среднеквадратическая ошибка $1,35 \cdot 10^{-17}$)	2,54

Таблица 2

Результаты точности распознавания МГИНС информационных образов УНТ типа 2

Интеллектуальная система	Точность отнесения информационных образов УНТ типа 2, %		Время обучения, с (2 ядра)
	к УНТ типа 1, P_{21}	к УНТ типа 3, P_{23}	
МГИНС	81,623	91,812	0,007

Таблица 3

Структура нейронной сети для прогнозирования МГИНС образов УНТ типа 2

Свойство структуры	Значение
Число слоев нейронной сети	2
Число скрытых слоев	1
Размерность входных данных A	100×3
Весовые коэффициенты w_1	$[10,9346, -1,3616, -1,1696]$
Элемент задержки b_1	-0,5733
Весовые коэффициенты w_2	1
Элемент задержки b_2	$1,8938 \cdot 10^{-9}$
Преобразователи F_1, F_2	$-1 + 2/(1 + e^{-2n})$
Выходные значения Y	$[-1 \ 1]$

Если предположить, что УНТ типа 2 не относятся ни к типу 1, ни к типу 3, то они могут быть выделены в отдельный класс, который будет содержать вероятностную информацию (P_{21} и P_{23}) о принадлежности их к известным «ИСНМ» типам 1 и 3. Тогда уравнение прогноза количественной величины F_2 характерного свойства для УНТ типа 2 может быть записано в следующем виде:

$$F_2 = (0,81623F_1 + 0,91812F_3)/2, \quad (1)$$

где F_1 и F_3 – известные количественные величины свойства для УНТ типов 1 и 3.

В табл. 4 и 5 представлены результаты прогнозирования основных физических свойств УНТ исследуемых образцов.

Проведя аналогичные расчеты для диаметров УНТ типов 1 и 3 в диапазоне 0–0,08 мкм с шагом 0,01 мкм, по формуле (1) в итоге получим наиболее точно прогнозируемые параметры УНТ типа 2 по их количеству и доле по массе (рис. 3, 4). В табл. 6 приведены результаты ошибки прогнозирования количества УНТ и их доли по массе. Результаты отражают возможность прогнозирования количества УНТ

диаметрами 0,02–0,03 мкм с минимальной ошибкой 11,6398 %, а доли по массе УНТ диаметрами 0,01–0,02 мкм – 4,7893 %.

Таблица 4

Прогнозирование свойств УНТ типа 2

Свойство УНТ	Известные значения для типов УНТ по результатам проведения ПЭМ и РЭМ			Прогнозируемые «ИСНМ» значения для УНТ типа 2
	УНТ типа 1	УНТ типа 2	УНТ типа 3	
Концентрация ферроцена, %	1	5	10	4,9987
Максимальное значение диаметра УНТ, мкм	0,0418	0,0516	0,0754	0,0516
Сумма всех значений диаметров УНТ, мкм	2,6980	2,9880	3,9960	2,9350
Средний диаметр УНТ, мкм	0,0180	0,0231	0,0344	0,0231
Количество УНТ в образце, шт.	150	150	116	126

Таблица 5

Ошибка прогнозирования свойств УНТ типа 2

Свойство УНТ	Ошибка прогноза, %
Концентрация ферроцена, %	0,026
Максимальное значение диаметра УНТ, мкм	0,140
Сумма всех значений диаметров УНТ, мкм	1,760
Средний диаметр УНТ, мкм	16,270
Количество УНТ в образце, шт.	15,500

Следует отметить, что для остальных диаметров УНТ до 0,01 мкм и 0,04–0,08 мкм ошибки прогнозирования были довольно высокими. Наиболее хорошо прогнозируемыми являются УНТ диаметрами 0,02–0,03 мкм.

Авторами были проведены исследования по построению уравнений регрессии распределения количества УНТ и их доли по массе в зависимости от диаметров (рис. 5, 6).



Рис. 3. Экспериментальные значения диаметров УНТ от диапазонов изменения их диаметров

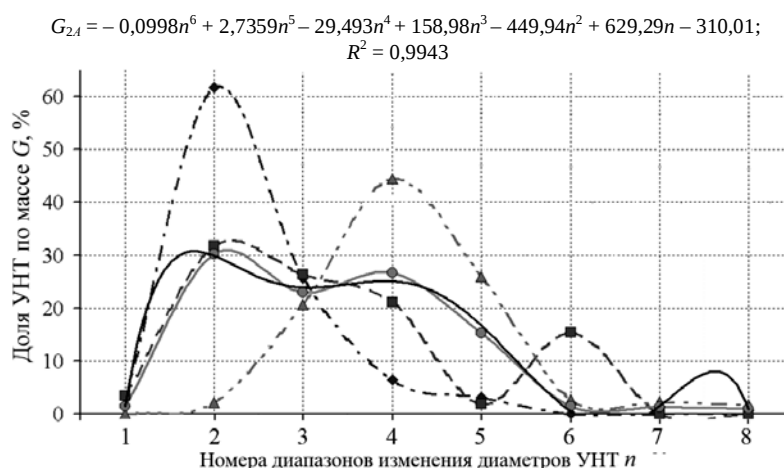


Рис. 4. Экспериментальные зависимости доли УНТ по массе от диапазонов изменения их диаметров (обозначения – на рис. 3)

Таблица 6

Прогнозируемое количество УНТ типа 2 по диаметру

Диапазон размеров УНТ, мкм	Прогнозируемые результаты для УНТ типа 2	
	Ошибка в прогнозировании количества УНТ, %	Ошибка в прогнозировании доли по массе УНТ, %
0,01–0,02	42,1208	4,7893
0,02–0,03	11,6398	12,9343
0,03–0,04	31,8508	25,7539
< 0,01, 0,04–0,08	45,9050	–

Были получены уравнения аппроксимации количества УНТ типов 1 и 3 (N_1 , N_3) от их диаметров в виде:

$$N_1 = 0,57821n^5 - 14,2748n^4 + 132,4417n^3 - 564,0784n^2 + 1051,4603n - 597;$$

$$N_3 = -0,29038n^5 + 6,9863n^4 - 61,5044n^3 + 237,5603n^2 - 375,8253n + 193,5,$$

а доли УНТ (G_1 , G_3) по массе соответственно:

$$G_1 = -0,085535n^6 + 2,6022n^5 - 31,7337n^4 + 196,7206n^3 - 642,8054n^2 + 1010,8026n - 532,4987;$$

$$G_3 = 0,054964n^7 - 1,8441n^6 + 25,1305n^5 - 178,0488n^4 + 697,1435n^3 - 1483,2921n^2 + 1572,9361n - 632,08.$$

Оптимальные регрессионные функции $N_1(d)$, $N_3(d)$ и $G_1(d)$, $G_3(d)$ были отобраны по минимуму ошибки распознавания диаметров УНТ и их доли по массе. Тогда функции распределения $N_2(d)$ и $G_2(d)$ для УНТ типа 2 могут быть записаны в следующем виде (рис. 7):

$$\begin{aligned} N_2 &= (0,81623N_1 + 0,91812N_3)/2 = \\ &= (0,81623 \cdot (0,57821n^5 - 14,2748n^4 + 132,4417n^3 - 564,0784n^2 + 1051,4603n - 597) + \\ &+ 0,91812 \cdot (-0,29038n^5 + 6,9863n^4 - 61,5044n^3 + 237,5603n^2 - 375,8253n + 193,5)) / 2 = \\ &= 0,10267n^5 - 2,6186n^4 + 25,8173n^3 - 121,1544n^2 + 256,5903n - 154,8165; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_2 &= (0,81623G_1 + 0,91812G_3)/2 = \\ &= (0,81623 \cdot (-0,085535n^6 + 2,6022n^5 - 31,7337n^4 + 196,7206n^3 - 642,8054n^2 + 1010,8026n - 532,4987) + \\ &+ 0,91812 \cdot (0,054964n^7 - 1,8441n^6 + 25,1305n^5 - 178,0488n^4 + 697,1435n^3 - 1483,2921n^2 + 1572,9361n - 632,08)) / 2 = \\ &= 0,025232n^7 - 0,88145n^6 + 12,5984n^5 - 94,6861n^4 + 400,3153n^3 - 943,2586n^2 + 1134,5958n - 507,4834. \end{aligned}$$

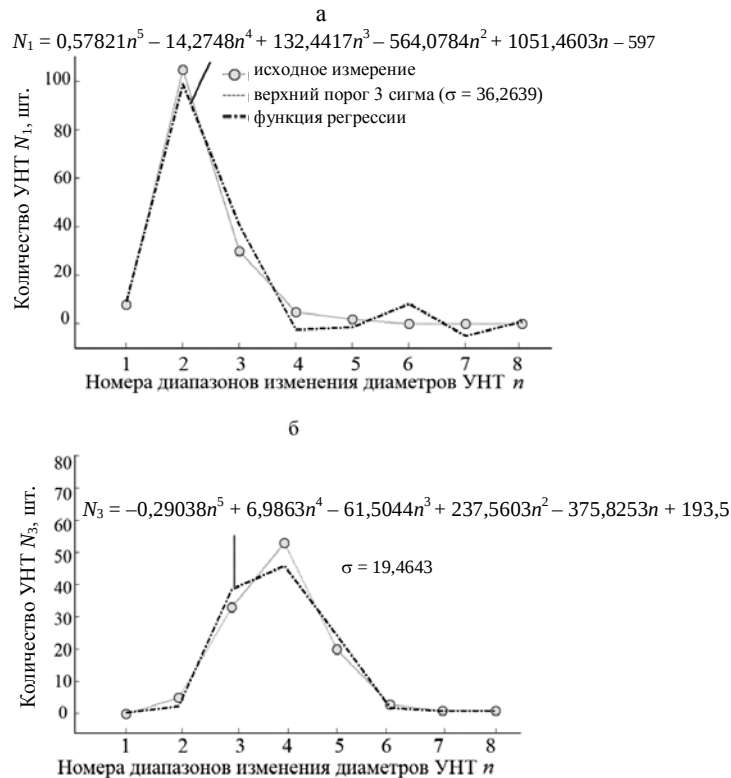


Рис. 5. Регрессия распределения количества УНТ от их диаметров:
а – УНТ типа 1; б – УНТ типа 3

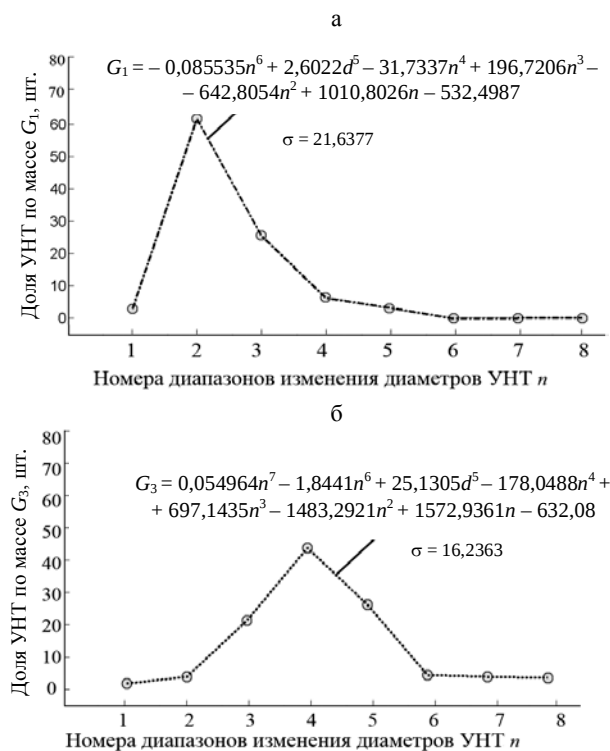


Рис. 6. Регрессия распределения доли по массе УНТ от диапазонов изменения их диаметров: а – УНТ типа 1; б – УНТ типа 3 (обозначения – на рис. 5)

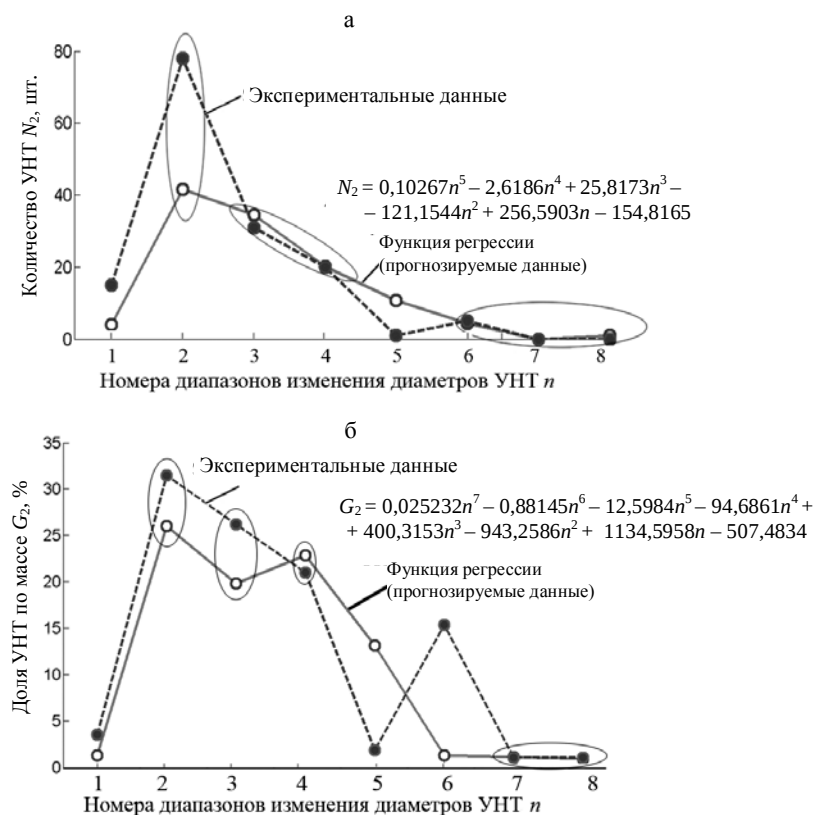


Рис. 7. Функция прогнозирования для УНТ типа 2: а – количества УНТ от их диаметров; б – доли по массе УНТ от их диаметров

Ошибки прогнозирования информационных образов УНТ представлены в табл. 7. Количество УНТ и их доля по массе могут быть особенно точно распознаны, если их диаметры составляют 0,01–0,02, 0,02–0,04, 0,05–0,08 мкм. Поскольку диаметр УНТ увеличивается с ростом концентрации ферроцена, то разработанная авторами интеллектуальная система «ИСНМ» вполне способна контролировать концентрацию ферроцена, высоту, диаметр и количество УНТ в процессе их синтеза.

Таблица 7
Ошибка прогнозирования количества УНТ
и доли их по массе с использованием
функции регрессии

Диаметр УНТ, мкм	УНТ типа 2	
	Ошибка прогнозирования количества УНТ, %	Ошибка прогнозирования доли по массе УНТ, %
0–0,01	–	–
0,01–0,02	46,5740	17,4530
0,02–0,03	11,1998	24,4801
0,03–0,04	0,7406	8,9148
0,04–0,05	–	–
0,05–0,06	13,2890	–
0,06–0,07	0	5,6966
0,07–0,08	8,1401	18,369

ВЫВОДЫ

Таким образом, становится возможным быстро и с применением недорогого, но «умного» оборудования успешно контролировать техпроцесс производства наноматериалов и сенсорных устройств, обладающих определенными требуемыми физическими характеристиками, например магнитно-функционализированными свойствами углеродных нанотрубок. Преимуществами использования «электронного глаза» для анализа наноструктуры является возможность недорогого и быстрого анализа ее топологии, сенсорных свойств, улучшенное управление одно- и двустадийным процессом

ми синтеза УНТ с тонкими и толстыми стенками.

Интеллектуальное управление временем синтеза массивов углеродных нанотрубок, например инъекционным CVD-методом, позволяет получить прочные наноструктуры, вовремя обнаружить разрушения УНТ при длительном синтезе. Это осуществляется за счет прогнозирования «ИСОН-4» внешнего и внутреннего диаметров углеродных нанотрубок и расстояний между ними, которые при увеличении приводят к ветвлению и повышению количества частиц сферической формы. Кроме того, прогнозируя концентрацию летучего источника катализатора ферроцена в реакционной смеси, возможно управлять магнитно-функционализированными свойствам УНТ, в частности концентрацией нанокompозита (с) и железосодержащими фазами наполнителя углеродных нанотрубок, например цементитом Fe_3C , удельной намагниченностью массивов трубок при определенной температуре. С увеличением концентрации ферроцена информационный образ УНТ отличается низкой дисперсией и высоким коэффициентом отражения, что свидетельствует о повышенном содержании в ней наполнителя Fe_3C и сильных магнитных свойствах трубок.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колешко, В. М. Мобильные телефоны, смартфоны и старение организма / В. М. Колешко, Е. А. Воробей, Н. А. Хмурович; БНТУ. – Минск: Техническая литература, 2011. – 326 с. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://narod.ru/disk/60891222001.1a194c215d368816ac3278233cf250d9/monograph.pdf.html>
2. Синтез и свойства магнитно-функционализированных углеродных нанотрубок / А. С. Басаев [и др.] // Российские нанотехнологии. – 2008. – Т. 3, № 3–4. – С. 115–121.
3. Intelligent Systems in Technology of Precision Agriculture and Biosafety / V. M. Koleshko [et al.] // Intelligent Systems Edited by Vladimir M. Koleshko. – InTech, March, 2012. – P. 1–36 [Electronic resource]. – Mode of access: <http://www.intechopen.com/books/intelligent-systems/>

Поступила 15.05.2012