

УДК 004.9

М. Голубовський, Б. Лемега, В. Ясній, д.т.н., доцент

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

АНАЛІЗ ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ У МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

М. Holubovskyi, B. Lemeha, V. Iasnii, Dr. Sci., Assoc. Prof.

ANALYSIS OF THE APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS IN MATERIALS SCIENCE

Машинне навчання (МН) – це галузь штучного інтелекту, яка дозволяє програмам навчатися та вдосконалювати свій функціонал без явного програмування. За останні роки кількість даних, зібраних у результаті досліджень матеріалів, значно зросла і методи МН надають основні інструменти для отримання корисної інформації з них. Програмне забезпечення, яке допомагає аналізувати дані досліджень тепер є поширеним і часто вільно доступним. Початок використання МН у матеріалознавстві можна прослідкувати з епохи появи перших потужних комп'ютерів. В цей період, в основному, використовувались класичні методи статистичного аналізу для дослідження фізичних та хімічних властивостей матеріалів. Зі зростанням обчислювальних потужностей відбулося значне розширення можливостей використання МН в матеріалознавстві.

Методи навчання з учителем (supervised learning) застосовуються для прогнозування характеристик матеріалів. Модель навчається на основі вхідних-вихідних пар даних, де для кожного вхідного прикладу існує відповідна вихідна мітка або категорія. Головна мета полягає в тому, щоб вивчити відповідність між вхідними даними і відповідними вихідними мітками, щоб модель могла коректно робити висновки і для нових, раніше не досліджуваних даних. Методи навчання без учителя (unsupervised learning) застосовуються для виявлення неочевидних закономірностей в даних, що важливо для дослідження комплексних властивостей матеріалів. Використання цього підходу передбачає, що модель намагається вивчити внутрішню структуру даних без використання попередньо визначених міток або цільових значень. Основна ідея полягає в тому, щоб дозволити алгоритму самостійно виявляти закономірності, шаблони або структури в не маркованих даних. Методи глибокого навчання (deep learning) та нейронні мережі, що є їх ключовим елементом, стали ефективним інструментом для моделювання складних структур і властивостей сплавів. Методи глибокого навчання застосовуються для аналізу, прогнозування властивостей і оптимізації структур сплавів з пам'яттю форми, що розширює їх застосування в промисловості. Методи підсиленого навчання (reinforcement learning) використовуються для оптимізації процесів виготовлення, вдосконалення властивостей та контролю якості матеріалів. В їх основі лежить через взаємодія програмної системи з навколишнім середовищем. Використання методів МН виявилось ключовим для прогресу в дослідження широкого спектру матеріалів, включаючи металеве скло, високоентропійні сплави, сплави з пам'яттю форми, магніти, суперсплави, каталізатори та різноманітні конструкційні матеріали.

Література

1. Machine learning for alloys / G.Hart, T. Mueller, C. Toher, C. Curtarolo. // Nature Reviews Materials. – 2021. – №6. – С. 1–5.
2. Machine learning for molecular and materials science / [K. Butler, D. Davies, H. Cartwright та ін.]. // Nature. – 2018. – №559. – С. 547–555.