

Міністерство освіти і науки України
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ДЕМЧИК ВЛАДИСЛАВ ІВАНОВИЧ

УДК 620.1:539.3:539.4:620.22

ДИСЕРТАЦІЯ

**МЕТОДИ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ
ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ТА ДОВГОВІЧНОСТІ СПЛАВІВ**

122 — Комп'ютерні науки
12 — Інформаційні технології

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело _____ (В.І. Демчик)

Науковий керівник:
Ясній Олег Петрович,
доктор технічних наук, професор

Тернопіль – 2026

АНОТАЦІЯ

Демчик В.І. Методи машинного навчання для моделювання функціональних властивостей та довговічності сплавів. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 “Комп’ютерні науки” (галузь знань 12 “Інформаційні технології”). — Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, 2026.

Стрімкий розвиток інформаційних технологій зумовив експоненційне зростання обсягів даних, що потребують сучасних методів їхнього аналізу та обробки. Проведення експериментальних досліджень у галузях механіки деформівного твердого тіла, фізики твердого тіла та матеріалознавства часто є фінансово затратним, тривалим і наукоємним процесом. Тому застосування методів машинного навчання на основі достатнього масиву експериментальних даних постає як ефективна альтернатива прямим експериментам.

Особливий інтерес у матеріалознавстві та механіці становлять сплави з пам’яттю форми, які поєднують унікальні функціональні властивості – ефект пам’яті форми та псевдопружність, що виникають унаслідок аустенітно-мартенситного перетворення. Дослідження та моделювання цих властивостей є актуальним завданням, яке доцільно розв’язувати методами машинного навчання з учителем.

Аналіз сучасного стану наукових робіт показав, що, хоча існує низка підходів до застосування машинного навчання у механіці та матеріалознавстві, питання прогнозування функціональних характеристик сплавів з пам’яттю форми та їхньої втомної довговічності залишаються недостатньо висвітленими. Це визначає актуальність розроблення нових методів, що базуються на алгоритмах машинного

навчання з учителем, для моделювання та прогнозування властивостей і довговічності таких матеріалів.

У першому розділі дисертаційної роботи детально розглянуто сплави з пам'яттю форми та їх функціональні властивості: відновлення, псевдопружність та висока демпфуюча здатність, котрі успішно застосовують у різного роду промисловій діяльності: кріплення, з'єднання, реагуючі на температуру системи безпеки, домашні прилади, одяг, актуатори у роботах і більшість медичних та біомедичних приладів. Також згадано такі функціональні властивості:

- Поведінка фазових перетворень: перехід СПФ між мартенситною та аустенітною фазами залежить від температури та рівня напружень. Таке перетворення є бездифузійним і зворотним, забезпечуючи їхню унікальну механічну поведінку.

- Термічний гістерезис: температури фазових переходів під час нагрівання та охолодження відрізняються, створюючи петлі гістерезису. Це впливає на поведінку СПФ під дією термічної втоми.

- Механічні та фізичні особливості: висока міцність та в'язкість. Приміром, СПФ на основі нітинолу можуть досягати межі міцності понад 1200 МПа і видовжуватися більше 10 %, не зазнаючи при цьому руйнування.

- Стійкість до корозії та біосумісність: СПФ, а особливо NiTi сплави добре підходять для медичних імплантатів внаслідок своєї стійкості до корозії та сумісності із тканинами тіла.

- Втомна поведінка: їхня поведінка за дії циклічного навантаження залежить від фази, температур переходу та мікроструктурної морфології.

Проаналізовано різноманітні методи машинного навчання та їх застосування у різних галузях науки і техніки. Зокрема, наведено їхні можливості для прогнозування властивостей сплавів з пам'яттю форми та для моделювання довговічності.

У другому розділі дисертаційної роботи описано методіку прогнозування функціональних властивостей СПФ методами машинного навчання, котра потрібна для побудови відповідних регресійних залежностей на основі відповідних алгоритмів.

Основними аспектами дослідження були система аналізу даних Orange, попередня обробка даних та аугментація відповідного набору даних. Як основний інструмент аналізу даних використовували програмне середовище Orange, котре дозволило здійснити повний цикл інтелектуального аналізу даних та побудувати відповідні регресійні залежності методами машинного навчання з учителем. Наведено методику попередньої обробки даних на основі перетворення ознаки у діапазон $[0, 1]$, що дозволило побудувати ефективні моделі машинного навчання, зокрема, нейронні мережі. Також представлено методики аугментації набору даних на основі кубічних сплайнів, методу інтерполяції Акіма та модифікованого методу takima. Подано загальну методику прогнозування функціональних властивостей СПФ у вигляді блок-схеми, яка відображає основні кроки побудови відповідних регресійних залежностей. Описані методики забезпечують високу точність прогнозування, що є фундаментом для науково обґрунтованих висновків та рекомендацій.

Описано метод k найближчих сусідів, метод опорних векторів, метод випадкових лісів, метод градієнтного спуску, методи бустінгу та метод нейронних мереж.

У третьому розділі дисертаційної роботи змодельовано та отримано регресійні залежності розмаху залишкових деформацій та розмаху розсіяної енергії для чотирьох досліджуваних зразків методом k найближчих сусідів, а також методом опорних векторів, методом стохастичного градієнтного спуску, випадковими лісами, нейронними мережами, градієнтним бустінгом та AdaBoost. Серед усіх досліджених методів, метод k найближчих сусідів, AdaBoost, градієнтний бустінг і випадковий ліс показали найкращі результати у термінах похибки прогнозування.

Змодельовано функціональні властивості NiTi СПФ методами машинного навчання з учителем. Моделювання здійснено у програмному комплексі аналізу даних Orange. Функціональні властивості СПФ, а саме, розмах розсіяної енергії, деформацій та напружень змодельовано методами kNN, AdaBoost, Random Forest, Gradient Boosting, Neural Network. Отримано відповідні регресійні залежності і здійснено крос-

валідацію результатів. Отримано помилки результатів і коефіцієнт детермінації моделювання методами МН з учителем для розмаху енергії, напружень та деформацій залежно від кількості циклів навантаження, відповідно. Для кожної фізичної величини найкращі результати у термінах помилок одержано методом k найближчих сусідів.

Застосовано НМ для прогнозування втомної довговічності елементів конструкцій, виконаних із титанових сплавів за дії циклічного навантаження. Зокрема, запропонована модель, котра ґрунтується на багатошаровому персептроні, прогнозує довжину втомної тріщини з високою точністю. Помилка прогнозування не перевищує 0,4 % для тестового набору даних, що вказує на можливість моделі відтворювати фізичні закони. НМ показала здатність адаптуватися до різних коефіцієнтів асиметрії циклу навантаження $R = 0,03; 0,1; 0,3$ та умов навантаження. Відсутність значних відхилень між навчальними та тестовими наборами даних підтверджує той факт, що модель не схильна до перенавчання і добре узагальнює на нових даних. Запропонована модель дозволяє точно оцінювати залишковий ресурс матеріалу елемента конструкції і дозволяє приймати рішення щодо ремонту та подальшої експлуатації елемента конструкції. Таким чином, побудована НМ дозволяє поєднувати традиційні моделі механіки руйнування з методами машинного навчання, збільшуючи точність прогнозування та зменшуючи залежність від розкиду експериментальних даних. Результати моделювання свідчать про ефективність запропонованої моделі для оцінки втомної поведінки елементів конструкцій за циклічного навантаження, зменшуючи ризик катастрофічних руйнувань в умовах експлуатації реального світу

Побудовано математичну модель опису петель гістерезису сплаву із пам'яттю форми, яка ґрунтується на методі найменших квадратів. Запропонований підхід дозволяє отримати залежності гістерезисної поведінки матеріалу на основі експериментальних даних. Встановлено, що модель досить добре описує діаграми деформування сплавів із пам'яттю форми.

Змодельовано розсіяну енергію нікельтитанового сплаву СПФ методами машинного навчання з учителем, врахувавши частоту циклу навантаження. Набір даних складався з петель гістерезису для шести частот циклу навантаження 0,1; 0,5; 1; 5; 7 та 10 Гц. Вхідні дані склалися з наступних ознак: напруження σ (МПа), номер циклу навантаження N та частота циклу навантаження f (Гц). Ґрунтуючись на цих даних, для кожного циклу навантаження i для кожної частоти навантаження, обчислено розсіяну енергію. Для того, аби додатково збільшити набір даних, його інтерпольовано модифікованим методом інтерполяції makima. Загалом, побудовано чотири моделі машинного навчання методами Random Forest, AdaBoost, Gradient Boosting та Neural Network. Для досліджуваного набору даних методи Gradient Boosting та Neural Network демонструють більші значення похибки прогнозування порівняно з ансамблевими методами. Тому згадані вище методи не підходять для розв'язування конкретної задачі.

Найкращі результати показали ансамблеві методи, такі як AdaBoost та Random Forest. Приміром, MAPE методу AdaBoost становила тільки 0,074, тоді як MAPE методу Random Forest складала 0,144.

Ключові слова: набір даних, наука про дані, нейронні мережі, MLP, штучний інтелект, машинне навчання, функціональні властивості, регресія, випадковий ліс, нейронна мережа, метали, моделювання, апроксимація, алгоритм, сплави

ABSTRACT

Demchyk V.I. Machine learning methods for modeling of functional properties and lifetime of alloys. — Qualifying scientific work on manuscript rights.

Dissertation for obtaining the scientific degree of Ph.D in specialty 122 “Computer Science” (12 “Information technologies”). — Ternopil Ivan Puluj National Technical University, Ternopil, 2026

The rapid development of information technology has led to exponential growth in data volume, requiring modern methods of analysis and processing. Conducting experimental research in the fields of deformable solid mechanics, solid physics, and materials science is often financially costly, long-term, and science-intensive. Therefore, the application of machine learning methods based on a sufficient dataset of experimental data appears to be an effective alternative to direct experiments.

Of particular interest in materials science and mechanics are shape memory alloys (SMAs), which combine unique functional properties - the shape memory effect and superelasticity, which arise because of the austenitic-martensitic transformation. Research and modelling of these properties is a relevant task best addressed with supervised machine learning methods.

The analysis of current scientific studies showed that although several approaches to applying machine learning in mechanics and materials science exist, the prediction of the functional characteristics of shape memory alloys and their fatigue durability remains insufficiently covered. This determines the relevance of developing new methods based on supervised machine learning algorithms to model and predict the properties and durability of such materials.

The first chapter of the dissertation discusses in detail shape memory alloys and their functional properties: recovery, superelasticity, and high damping capacity, which are successfully used in various types of industrial activities: fasteners, connections,

temperature-responsive security systems, household appliances, clothing, actuators in robots, and most medical and biomedical devices. The following functional properties are also mentioned:

- Behaviour of phase transformations: the transition of shape memory alloys between the martensitic and austenitic phases depends on temperature and stress. This transformation is diffusionless and reversible, providing their unique mechanical behavior.

- Thermal hysteresis: the phase transition temperatures differ between heating and cooling, creating hysteresis loops. This affects the SMA's behaviour under thermal fatigue.

- Mechanical and physical properties: high strength and toughness. For example, Nitinol-based SMA can reach a tensile strength of more than 1200 MPa and elongate by more than 10% without failure.

- Corrosion resistance and biocompatibility: SMA and, especially, NiTi alloys are well-suited for medical implants due to their corrosion resistance and compatibility with body tissues.

- Fatigue behaviour: their behaviour under cyclic loading depends on the phase, transition temperatures, and microstructural morphology.

Various machine learning methods and their applications in different fields of science and technology are analysed. Their capabilities for predicting the properties of shape memory alloys and for modelling durability are presented.

The second chapter of the dissertation describes the methodology for predicting the functional properties of SMAs using machine learning methods, which is necessary for constructing the corresponding regression dependencies based on the corresponding algorithms. The main aspects of the study were the Orange data analysis system, data preprocessing, and data set augmentation. The Orange software environment served as the primary tool for data analysis, enabling a full cycle of intelligent analysis and the construction of corresponding regression models using supervised machine learning methods. A data preprocessing methodology that transforms features to the range $[0, 1]$ is presented, enabling the construction of effective machine learning models, in particular

neural networks. Also presented are methods for augmenting the dataset based on cubic splines, the Akima interpolation method, and the modified makima method. A general method for predicting the functional properties of SMAs is presented as a flowchart outlining the main steps for constructing the corresponding regression models. The described methods provide high prediction accuracy, which is the foundation for scientifically sound conclusions and recommendations.

The k -nearest neighbours method, support vector method, random forest method, gradient descent method, boosting methods, and neural network method are described.

In the third chapter of the dissertation, the regression dependences of the residual strain amplitude and the dissipated energy amplitude for the four studied samples were modelled and obtained by the k -nearest neighbours method, as well as by the support vector method, the stochastic gradient method, random forests, neural networks, gradient boosting, and AdaBoost. Among the studied methods, k -nearest neighbours, AdaBoost, gradient boosting, and random forest yielded the best results in terms of prediction error.

The functional properties of NiTi SMA are modelled using supervised machine learning. The modelling was carried out in the Orange data analysis software package. The functional properties of the SMA, namely the ranges of dissipated energy, strains, and stresses, were modelled using k NN, AdaBoost, Random Forest, Gradient Boosting, and Neural Networks. The corresponding regression dependencies were obtained, and the results were cross-validated. The errors in the results and the coefficient of determination from modelling using supervised ML methods, across ranges of energy, stresses, and strains, were obtained for different numbers of load cycles. For each physical quantity, the k -nearest neighbours method yielded the lowest errors.

NM was applied to predict the fatigue life of structural elements made of titanium alloys under cyclic loading. In particular, the proposed multilayer perceptron-based model predicts fatigue crack length with high accuracy. The prediction error does not exceed 0.4% on the test data set, indicating the model's ability to reproduce physical laws. The NM showed the ability to adapt to different load cycle asymmetry coefficients, $R = 0.03, 0.1,$ and

0.3, and loading conditions. The absence of significant deviations between the training and test data sets confirms the fact that the model is not prone to overtraining and generalizes well to new data. The proposed model enables an accurate assessment of the residual resource of the structural element material and allows conclusions to be drawn about its repair and functionality. Thus, the constructed neural network allows combining traditional fracture mechanics models with machine learning methods, thereby increasing prediction accuracy and reducing dependence on experimental data scatter. The proposed model is a reliable tool for assessing the fatigue behaviour of structural elements under cyclic loading, reducing the risk of catastrophic failures in real-world operating conditions. A mathematical model for describing the hysteresis loops of an alloy with shape memory, based on the least squares method, has been constructed. The proposed approach allows determining the material's hysteretic behavior dependencies from experimental data. It was established that the model describes the deformation diagrams of shape memory alloys quite well.

The dissipated energy of the nickel-titanium alloy SMAs was modelled using supervised machine learning methods, accounting for the loading cycle frequency. The data set consisted of hysteresis loops for six loading cycle frequencies: 0.1, 0.5, 1, 5, 7, and 10 Hz. The input data consisted of the following features: stress σ (MPa), loading cycle number N , and loading cycle frequency f (Hz). Based on these data, the dissipated energy was calculated for each loading cycle and for each loading frequency. To further increase the data set, it was interpolated using the modified makima interpolation method. In total, four machine learning models were built using the Random Forest, AdaBoost, Gradient Boosting and Neural Network methods. It was found that Gradient Boosting and Neural Network methods are not suitable for this dataset, since the prediction errors are quite large. Therefore, the above-mentioned methods are not suitable for solving a specific problem. The best results were shown by ensemble methods such as AdaBoost and Random Forest. For example, the MAPE of the AdaBoost method was only 0.074, while the MAPE of the Random Forest method was 0.144.

Keywords: dataset, data science, neural networks, MLP, artificial intelligence, machine learning, functional properties, regression, random forest, neural network, metals, modelling, approximation, algorithm, alloys

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ
Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації

Публікації у фахових виданнях України:

1. Yasniy O., **Demchyk V.**, Lutsyk N. Modelling of functional properties of shape-memory alloys by machine learning methods. Scientific Journal of the Ternopil National Technical University, Vol. 108, 2022, P. 74-78.
https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2022.04.074
2. Ясній О., **Демчик В.** Сплави з пам'яттю форми і машинне навчання: огляд. Measuring and computing devices in technological processes, Vol. 82, 2025, P. 13-17.
<https://doi.org/10.31891/2219-9365-2025-82-2>
3. **Demchyk V.**, Yasniy O. (2025) Modelling of functional properties of shape memory alloy by machine learning methods. Scientific Journal of the Ternopil National Technical University, Vol. 119, No. 3, P. 56-62.
https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2025.03.056

Публікації у виданнях, які індексується у міжнародній наукометричній базі
Scopus:

1. Yasniy O., Didych I., Tymoshchuk D., Maruschak P., **Demchyk V.** Prediction of structural elements lifetime of titanium alloy using neural network. Procedia Structural Integrity, Vol. 72, 2025, P. 181-187.
<https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.08.090>
2. Hutsaylyuk V., **Demchyk V.**, Yasniy O., Lutsyk N., Fiialka A. The modelling of NiTi shape memory alloy functional properties by machine learning methods, Applied Computer Science, Vol. 21, No. 4, 2025, P. 127-135.
https://doi.org/10.35784/acs_7986

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Моделі гістерезисної поведінки матеріалів із пам'яттю форми / Ясній О., Ясній В., Сулим Г., Пастернак Я., **Демчик В.** // Матеріали Міжнародної науково-технічної конференції „Міцність і довговічність сучасних матеріалів та конструкцій“, 10-11 листопада 2022 року. — Т. : ФОП Паляниця В. А., 2022. — С. 148–150. — (Нові та сучасні матеріали та технології).
2. Yasniy O., Lutsyk N., **Demchyk V.**, Osukhivska H., Malyshevska O. The prediction of structural properties of Ni-Ti shape memory alloy by the supervised machine learning methods, 3rd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems, November 22–24, 2023, Ternopil, Ukraine, Opole, Poland.

ЗМІСТ

ВСТУП	16
РОЗДІЛ 1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	21
1.1. Сплави з пам'яттю форми	21
1.2. Функціональні властивості сплавів з пам'яттю форми	25
1.3. Сплави з пам'яттю форми та машинне навчання	26
1.4. Прогнозування властивостей СПФ методами машинного навчання	32
1.5. Моделювання довговічності методами машинного навчання	34
1.6. Висновки до розділу 1	36
РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА ПРОГНОЗУВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПФ МАШИНИМ НАВЧАННЯМ	37
2.1. Система аналізу даних Orange	37
2.2. Попередня обробка даних	39
2.3. Аугментація набору даних	40
2.4. Методика моделювання функціональних властивостей СПФ	41
2.5. Основні метрики методів машинного навчання	46
2.6. Методи машинного навчання	48
2.6.1. Метод k найближчих сусідів	51
2.6.2. Метод опорних векторів	57
2.6.3. Метод випадкових лісів	65
2.6.4. Метод градієнтного спуску	67
2.6.5. Методи бустінгу	68
2.6.6. Метод нейронних мереж	70
2.6.7. Архітектура нейронних мереж та методи їх навчання	76
2.7. Висновки до розділу 2	83
РОЗДІЛ 3 МОДЕЛЮВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПФ ТА ДОВГОВІЧНОСТІ ТИТАНОВОГО СПЛАВУ	85
3.1. Моделювання розмаху розсіяної енергії, напружень та деформацій СПФ	85

3.2. Моделювання розмаху залишкових деформацій та розмаху розсіяної енергії СПФ	89
3.3. Моделювання втомної довговічності титанового сплаву	102
3.4. Моделювання гістерезисної поведінки СПФ	111
3.5. Моделювання функціональних властивостей СПФ з урахуванням частоти навантаження	116
3.6. Висновки до розділу 3	119
ВИСНОВКИ	122
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	124
Додатки.....	139
Додаток А.....	139
Додаток Б	141
Додаток В	142

ВСТУП

Актуальність теми. Стрімкий розвиток інформаційних технологій призвів до надзвичайно швидкого, експоненційного зростання кількості доступних даних, котрі потребують сучасних алгоритмів їхнього опрацювання. Проведення експериментів, особливо у галузі механіки деформівного твердого тіла, фізики твердого тіла чи матеріалознавства є часто дороговартісним, затратним з огляду часу та наукоємким процесом. Тому, за достатнього обсягу експериментальних даних, доцільно у деяких випадках відмовитися від проведення прямого експерименту та скористатися доступними методами машинного навчання для розв'язування певної задачі.

Особливо перспективними та багатообіцяючими у матеріалознавстві та механіці є так звані сплави з пам'яттю форми. Це матеріали, в яких зацікавлені як наука, так і промисловість. Сплави з пам'яттю форми користуються широкою увагою з огляду на дві їхні особливі властивості: унікальний ефект пам'яті форми та псевдопружність, спричинені прямим аустенітно-мартенситним перетворенням і зворотним мартенситно-аустенітним перетворенням.

Такі матеріали володіють низкою конструкційних та функціональних властивостей. Власне, вивчення та моделювання останніх стосується дане дисертаційне дослідження. Такі властивості зручно вивчати та прогнозувати методами машинного навчання з учителем на основі наявних експериментальних даних.

У результатів проведеного аналізу поточного стану досліджень у галузі моделювання функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми встановлено, що існує низка методів та підходів для розв'язування задач механіки та матеріалознавства методами машинного навчання, однак прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та втомної довговічності матеріалів елементів конструкцій у доступних літературних джерелах висвітлено недостатньо.

У зв'язку з цим зростає актуальність дослідження та розроблення нових методів, котрі ґрунтуються на підходах машинного навчання з учителем для прогнозування функціональних властивостей та довговічності сплавів з пам'яттю форми.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами. Дисертаційна робота пов'язана з науковими дослідженнями на кафедрі систем штучного інтелекту та інтелектуального аналізу даних Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя і виконана у рамках науково-дослідної роботи: “Моделювання функціональних і конструкційних властивостей сплавів з пам'яттю форми методами машинного навчання” (реєстраційний № 0122U001858) та науково-дослідної роботи «Розв'язування задач науки методами штучного інтелекту».

Мета і завдання дисертаційної роботи. Мета роботи полягає у розробленні нових ефективних методів і моделей для прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми з урахуванням частоти навантаження та довговічності конструкційних матеріалів, котрі ґрунтуються на методах машинного навчання з учителем. Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити такі завдання:

- проаналізувати відомі методи і засоби прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів;
- розробити методики прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів;
- побудувати та проаналізувати моделі прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів, котрі ґрунтуються на методах машинного навчання з учителем;
- отримати регресійні залежності функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів методами машинного навчання з учителем.

Об'єктом дослідження є процеси визначення регресійних залежностей функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів методами машинного навчання з учителем.

Предметом дослідження є методи, моделі та алгоритми машинного навчання для прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів.

Методи дослідження. У дисертаційній роботі для розв'язування поставлених задач скористалися такими методами: для прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та довговічності матеріалів — регресійними залежностями: для розроблення моделей — алгоритмами машинного навчання з учителем.

Наукова новизна отриманих результатів. У роботі запропоновано нові підходи, методи та моделі для прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми.

При цьому вперше:

- розроблено методіку прогнозування розмаху розсіяної енергії та залишкової деформації нікельтитанового сплаву з пам'яттю форми (СПФ) із застосуванням методів машинного навчання з учителем, що забезпечує підвищену точність оцінки функціональних властивостей матеріалу;

- показано можливість підвищення точності прогнозування функціональних характеристик СПФ завдяки використанню алгоритмів машинного навчання з учителем, що відрізняє запропонований підхід від традиційних емпіричних та аналітичних методів;

- запропоновано моделювати та спрогнозовано залежність довжини тріщини від кількості циклів навантаження титанового сплаву методом машинного навчання з учителем, зокрема нейронною мережею типу багатошарового персептрона, що дозволяє отримати високоточні прогнози розвитку втомних пошкоджень.;

- побудовано аналітичну модель петель гістерезису нікельтитанового СПФ на основі мінімізації функціоналу методом найменших квадратів із застосуванням кусково-лінійних функцій, що забезпечує новий інструмент для опису нелінійної поведінки матеріалу.

Практичне значення отриманих результатів полягає у покращенні відомих підходів до прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та втомної довговічності матеріалів, зокрема:

- розроблено методи прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми та втомної довговічності матеріалів на основі методів машинного навчання з учителем, зокрема, нейронними мережами на основі багат шарового персептрона;

- побудовано моделі, котрі ґрунтуються на класичних і ансамблевих методах машинного навчання, що дає змогу визначити оптимальне поєднання методу машинного навчання та набору даних для певної задачі регресії;

- запропоновані підходи, котрі ґрунтуються на методах машинного навчання з учителем, дають змогу підвищити точність прогнозування моделей.

Отримані результати досліджень впроваджено в навчальний процес кафедри будівельної механіки Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя при підготовці магістрів за спеціальністю G19 Будівництво та цивільна інженерія.

ТОВ «Реворк-Спейс» підтверджено можливість застосування побудованих методами машинного навчання моделей в дослідницьких проєктах компанії.

Результати даної науково-дослідної роботи можуть використовуватися для розв'язування задач механіки руйнування засобами штучного інтелекту в атомній та нафтогазовій промисловості, а також у трубопровідному транспорті

Особистий внесок здобувача. У рамках дисертаційної роботи виконано планування досліджень, реалізацію підходів для прогнозування функціональних

властивостей сплавів з пам'яттю форми методами машинного навчання спільно з науковим керівником д. т. н., проф. О. П. Яснієм. Крім того, спільно з проф. О.П. Яснієм підготовлено матеріали для наукових публікацій, що відображають основні результати дисертації. Автор розробив систему прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми методами машинного навчання з учителем з урахуванням частоти навантаження. Здійснено порівняльний аналіз застосованих методів машинного навчання для розв'язування задачі регресії та вибрано найточніші моделі.

Апробація результатів дисертації. Основні положення та результати дисертації доповідались на: Міжнародній науково-технічній конференції, присвяченій 70-річчю від дня народження член-кореспондента НАН України, проф. Яснія Петра Володимировича „Міцність і довговічність сучасних матеріалів та конструкцій“ (Тернопіль, 10-11 листопада, 2022 р.); 3rd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems, November 22–24, 2023, Ternopil, Ukraine, Opole, Poland.

Публікації. Основні результати дисертації висвітлено у 7 наукових працях, серед яких 3 статей у фахових виданнях України, 2 статті у періодичному виданні, яке індексується міжнародною наукометричною базою Scopus, 2 публікації у матеріалах і тезах доповідей міжнародних і всеукраїнських наукових конференціях, з яких 1 індексується наукометричною базою Scopus.

Структура дисертації. Дисертація складається із анотації, вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Робота містить 142 сторінки, у тому числі: 137 сторінок основного тексту, 44 рисунки, 10 таблиць, список використаних джерел із 131 найменувань на 15 сторінках.

РОЗДІЛ 1

ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1. Сплави з пам'яттю форми

Традиційні, класичні матеріали на кшталт металів та сплавів відігравали значну роль у якості конструкційних матеріалів впродовж багатьох століть [1]. Інженери проектували вироби та вибирали сплави, використовуючи класичний інженерний підхід для аналізу макроскопічних властивостей матеріалів, і обирали підходящі, щоб забезпечити бажану функціональність для певного застосування [2]. З розвитком матеріалознавства та із збільшенням розмірів конструкцій та логістичними обмеженнями, вчені постійно винаходили високоякісні матеріали для різних практичних застосувань [2]. Однією з основних задач інженерії є поліпшення ефективності виробів та зменшення їх ваги без втрати коштів або технічних характеристик. Для досягнення цієї мети, заміна багатокomпонентних систем або систем із багатьма матеріалами на меншу кількість легких, високопродуктивних матеріалів є досить привабливою перспективою [2], [3]. Такі сучасні матеріали відіграють важливу роль у розвитку інженерії на зразок Airbus A380, Boeing 787 Dreamliner, надійних автомобілів з низькими витратами палива, кращих методів доставки ліків та ін. [4]. Інноваційні інженерні рішення у різних галузях інженерії відповідають усім вимогам, користуючись досягненнями багатьох новітніх технологій та задовольняючи виклики завтрашніх потреб [4].

Сплави з пам'яттю форми (СПФ) – це матеріали, в яких зацікавлена як наука, так і промисловість [5]. Ці матеріали користуються широкою увагою з огляду на дві їхні особливі властивості: унікальний ефект пам'яті форми та псевдопружність, спричинені прямим аустенітно-мартенситним перетворенням і зворотним мартенситно-аустенітним перетворенням [6], [7]. Існує багато видів СПФ, зокрема, найбільш поширені — це: сплави на основі нікелю, сплави на основі заліза, сплави на

основі міді та магнітні СПФ [1]. Одним із прикладів магнітних СПФ є сплав Ni-Mn-Ga.

Прикладами популярних комерційно доступних СПФ є сплави на основі Co-Al-Ni, Fe-Mn-Si, Co-Zn-Al та Ni-Ti, з яких останній є найбільш розповсюдженим через найкраще відтворювані термомеханічні характеристики, більшу міцність, великий розмах петлі гістерезису та біосумісність [8], [9]. Також двокомпонентний (бінарний) сплав нітинол (NiTi) є матеріалом, який найбільш широко застосовують з поміж існуючих СПФ, оскільки він може відновлюватися після деформацій, котрі сягають аж до 8% [10]. Бінарний NiTi проявляє не тільки односторонній ефект пам'яті форми, але також і псевдопружність та двосторонній ефект пам'яті форми, який можна коригувати, змінивши вміст нікелю у сплаві та застосувавши термомеханічну обробку [11].

СПФ можуть відновлювати свою початкову форму, запам'ятовуючи її між двома фазами перетворення, які залежать від дії зовнішніх чинників: температури, навантаження або магнітного поля. Відомі дві кристалічні фази СПФ: батьківська фаза (аустеніт), яка є стабільною за високих температур, і похідна фаза (мартенсит), стабільна за низьких температур. Через свою відносну м'якість, СПФ легко деформується у мартенситній фазі. Аустенітна фаза є добре впорядкованою об'ємоцентричною кубічною структурою з одним ступенем вільності. Мартенситна фаза володіє низькою симетрією, і, залежно від фазового переходу, може існувати у різних конфігураціях (моноклінній, орторомбічній та ромбоедричній структурах) [12].

У матеріалах з бездифузійними характеристиками, мартенситне перетворення є одномоментним термопружним кристалічним механічним замінним процесом першого роду, у якому атоми рухаються разом, зазвичай через механізм зсуву. Двійниковий мартенсит формується тоді, коли аустеніт із об'ємоцентричної кубічної структури розщеплюється у компактно упаковану гексагональну структуру з моноклінною або орторомбічною кристалічною ґраткою [13]. Односторонні,

двосторонні та тристоронні ефекти пам'яті форми можливі через цей зсув у твердому стані [13], [14].

Властивості СПФ. Ефект пам'яті форми (ЕПФ). Коли незворотно деформовані СПФ нагрівають понад певну температуру переходу і внаслідок цього СПФ повертаються до своєї початкової форми (недеформованого стану), проявляється ефект пам'яті форми (ЕПФ). Коли температуру або напруження прикладають до СПФ, він піддається дії зворотного мартенситного перетворення між двома фазами: аустенітом та мартенситом [15]. Молекулярна структура двійникується впродовж мартенситної фазової трансформації. На макроскопічному рівні, зворотно деформована мартенситна фаза є такого ж самого розміру та форми, як кубічна аустенітна фаза.

Ці властивості проявляються завдяки зворотному термопружному перетворенню першого роду між двома твердими фазами: B19' моноклінний мартенсит (M), стабільний за низьких температур, і B2 об'ємцентрований кубічний аустеніт (A), стабільний за високих температур. Фазові перетворення між аустенітом та мартенситом (і навпаки) позначені переходом між характеристичними температурами. Їх є всього чотири: температура початку мартенситу (M_s), температура закінчення мартенситу (M_f), температура початку аустеніту (A_s) та температура закінчення аустеніту (A_f). За певних термомеханічних умов, може з'являтися трикутна фаза (R), яка ідентифікується температурою початку R фази (R_s) та температурою закінчення R фази (R_f). R фаза характеризується трикутною структурою, яку можна розглядати як деформацію аустенітної кристалічної ґратки, яка виявляється проміжною фазою між аустенітом та мартенситом [16] та може впливати на механічну поведінку сплаву [17].

Коли температура СПФ нижча за M_f та сплав деформується в мартенситній фазі, проявляється ЕПФ. СПФ відновлює свою початкову форму при нагріванні понад A_f [18]. СПФ змінює свою кристалічну ґратку з аустеніту (B2) до мартенситу (B19) з моноклінною гранецентрованою кубічною формою (B19') або орторомбічною

гранецентрованою кубічною формою. Оскільки СПФ нахилений або стиснутий, моноклінна фаза не має рівних сторін у кристалічній комірці та прямих кутів. Деформація кубічної батьківської фази призводить до появи R фази (трикутної), проміжної фази між аустенітом та мартенситом (ромбогедричної). Від $B2$ до R дислокацій формуються, розширюються та об'єднуються тонкі R -фазні пластинки, аж поки ціла ділянка не перетвориться на R -фазу [5]. Коли пластинки зменшуються і зникають, фаза переходить в аустеніт. При нагріванні СПФ вище температури переходу процес може перебігати в іншу сторону (бути зворотним). Структура СПФ повертається до своєї оригінальної форми, тобто фази аустеніту, за високих температур, яка є більш стабільною [19].

СПФ корисні для таких виробів, як актуатори, тобто, матеріали, які змінюють форму, жорсткість, позицію, власні частоти та інші механічні характеристики у відповідь на температуру. Актуатори зі СПФ виготовляють у формі дроту, пружини або у формі стрічки. Можливо отримати величезні сили з точки зору відношення об'єму до сили [20].

Як актуатор, елемент конструкції, виконаний із СПФ із одностороннім ЕПФ, може забезпечувати силу/переміщення в одному напрямку. Приміром, дротина, яка може стискатися при нагріванні, не розширюється без прикладання зовнішньої сили, коли сплав охолоджують. Це є недоліком односторонніх СПФ-актуаторів. Механізм відновлення (зсуву) мусить бути застосований, коли актуатор має повернутися до оригінальної (холодної) форми після фази нагрівання [20].

Застосування таких матеріалів досить просте. СПФ можна деформувати, приклавши зусилля, і він відновить свою початкову форму або розмір після нагрівання вище певної температури [21]. Відомо багато різних видів СПФ, приміром, Fe–Mn–Si, Cu–Zn–Al, та Cu–Al–N, і кожен вид СПФ застосовують певним чином, хоча сплав нітинол на основі Ni–Ti знаходить своє застосування повсюдно через свої стабільні властивості [22]. СПФ широко користуються у медицині [23], аерокосмічному будівництві [24], моторобудуванні [25], цивільному будівництві [26] та ін. Впродовж їх

експлуатації, такі елементи конструкцій піддаються дії тривалого циклічного навантаження, яке може призвести до передчасної втрати функціональних властивостей, вичерпання ресурсу і подальшого руйнування. Забезпечення достатніх функціональних властивостей та витривалості СПФ є актуальною задачею.

1.2. Функціональні властивості сплавів з пам'яттю форми

Властивості сплавів з пам'яттю форми [27]: відновлення, псевдопружність та висока демпфуюча здатність [28], [29], [30], зараз успішно застосовують у різного роду промисловій діяльності: кріплення, з'єднання, реагуючі на температуру системи безпеки, домашні прилади, одяг, актуатори у роботах і більшість медичних та біомедичних приладів.

Такі функціональні властивості майже повністю досліджено у Ni-Ti та Cu-Al-Zn сплавах, у яких спостерігається термпружне мартенситне перетворення [31]. Одні матеріали наявні на ринку (CuAl-Ni, Fe-Mn-Si), тоді як інші мають цікавий потенціал, однак їх складно виготовляти або вони страждають від крихкості (Ni-Al, Ni-Ti-Zr, P-Ti). У цих сплавах ЕПФ поки досліджено як функцію температури або одновісних напружень, що відповідають за прямі та зворотні перетворення. Іншим важливим явищем є магнітно індуковане мартенситне перетворення з можливістю створення ЕПФ [32]. Це уможлиблює дуже швидкий час відповіді і набагато збільшує діапазон актуаторів.

СПФ володіють низкою функціональних властивостей. Зокрема, до основних функціональних властивостей, окрім вищезгаданих ефекту пам'яті форми та псевдопружності, належать:

Поведінка фазових перетворень. Перехід СПФ між мартенситною та аустенітною фазами залежить від температури та рівня напружень. Таке перетворення є бездифузійним і зворотним, забезпечуючи їхню унікальну механічну поведінку.

Термічний гістерезис. Температури фазових переходів під час нагрівання та охолодження відрізняються, створюючи петлі гістерезису. Це впливає на поведінку СПФ під дією термічної втоми.

Механічні та фізичні особливості. Висока міцність та в'язкість. Приміром, СПФ на основі нітинолу можуть досягати межі міцності понад 1200 МПа і видовжуватися більше 10 %, не зазнаючи при цьому руйнування.

Стійкість до корозії та біосумісність. СПФ, а особливо NiTi сплави добре підходять для медичних імплантатів внаслідок своєї стійкості до корозії та сумісності із тканинами тіла.

Втомна поведінка. Їхня поведінка за дії циклічного навантаження залежить від фази, температур переходу та мікроструктурної морфології.

СПФ знаходять багато різних застосувань. Так, їх широко застосовують в актуаторах та сенсорах. Приміром, СПФ можуть замінити традиційні актуатори у компактних системах, які забезпечують твердотільний рух без моторів або гідравліки. СПФ також користуються у медицині. Їх застосовують у стентах, ортодонтичних дросинах та хірургічних інструментах завдяки їхньому ЕПФ та біосумісності. СПФ можна побачити і в аерокосмічній галузі та робототехніці. Адже такі сплави ідеальні для адаптивних структур та компонентів роботів, які вимагають точних рухів та контролю форми

1.3. Сплави з пам'яттю форми та машинне навчання

Доволі часто проведення випробувань є досить дорогавартісним з огляду на ресурси та часозатратним і вимагає залучення експертів та наявності відповідного лабораторного обладнання. Тому важливо здійснювати моделювання функціональних та конструкційних властивостей СПФ, застосовуючи різноманітні методи ШІ та МН.

У науковій літературі представлено обмежену кількість досліджень, котрі стосуються цієї тематики. Приміром, міцність та довговічність конструкційних

елементів спрогнозовано у роботах [33], [34]. Одними із першопроходців у галузі прогнозування коротких тріщин методами НМ були G. M. Seed та G.S. Murphy [35].

Межу витривалості і межу втоми за різної асиметрії циклу навантаження спрогнозовано у праці [36]. Параметри закриття тріщини визначали, застосовуючи НМ у праці [37]. У дослідженні [38] кумулятивну функцію розподілу втомної довговічності передбачали НМ. Запропонована модель мала два вхідні нейрони і один вихідний нейрон. Входами моделі були напруження S , і час t , коли напруження було прикладено. Вхідний набір даних ґрунтувався на експериментально визначених кривих $S-N-P$ для сталі SAE 8620. Кількість нейронів прихованого шару вибрано рівну 5, потім її поступово збільшили до 10, і аж до 15. Значення функції максимуму правдоподібності, обчислене оптимізацією функцією логарифмічно-нормального розподілу, вибрано за функцію втрат L . Таким чином, НМ прогнозувала значення функції максимуму правдоподібності краще, аніж результати, котрі отримано за допомогою логарифмічно-нормальної функції. Навчання нейромережі припиняється, коли значення функції втрат L , отриманої цією моделлю, буде кращим за значення, отримане за логарифмічно-нормальним розподілом. У подальшому, такі підходи розвинуто у роботі [39] для оцінки залишкової довговічності, котра ґрунтувалася на аналізі моделі пошкоджуваності у випадку широкосмугового процесу Гауса з двома вершинами. У праці [40] застосовано НМ для виявлення малих втомних тріщин. У роботі [41] передбачено швидкість росту втомної тріщини за допомогою методів МН. У дослідженні [42] запропоновано новий підхід до оцінки втомної пошкоджуваності, котрий ґрунтується на НМ. Показано, що підхід на основі НМ забезпечив вищу точність передбачення довговічності елементів конструкцій для певної послідовності навантаження порівняно з правилом лінійного підсумовування пошкоджень Палмгрена-Майнера. У роботі [43] запропоновано альтернативний метод, котрий дозволяє передбачити втомну довговічність за випадкового навантаження, ґрунтуючись на розпізнаванні образів за допомогою НМ. Високий коефіцієнт кореляції і параметри моделі апроксимації отримано в порівнянні з методом матриць

дощу, який базується на правилі лінійного підсумовування напружень Майнера. Методи машинного навчання набули широкого застосування в недавні роки для створення СПФ з оптимальними функціональними властивостями і також для передбачення їх фізико-механічних властивостей, хімічного складу і радіусів атомів його елементів [44], а також температурних залежностей псевдопружних відновлювальних деформацій [45].

ШІ може ефективно моделювати поведінку СПФ [46]. Ця галузь науки значно змінилася з часом. Методи ШІ активно застосовують у матеріалознавстві та механіці руйнування [47], [48].

Машинне навчання є одним з напрямів штучного інтелекту [49], що дозволяє будувати моделі для розв'язування складних задач на основі даних. Воно показало великі успіхи у моделюванні розумних матеріалів [50], [51]. Відкриття нових матеріалів здійснюють методами ШІ [52].

У роботі [53] запропоновано та розроблено модуль вибору матеріалів методами штучного інтелекту. Цей модуль є потужним програмним забезпеченням, котре ґрунтується на методах МН, які дозволяють дослідження та виявлення СПФ з бажаними властивостями. У цьому дослідженні виявлено СПФ з найменшим розмахом перетворення і актуальною інформацією принаймні 1,5 % за прикладеного напруження 50 МПа або більше. Набір даних складався із 88 ознак, котрі стосувалися складу матеріалу, його обробки, параметрів випробувань, і 26 відповідей матеріалу стосовно функціональних властивостей і характеристик мікроструктури. Для розв'язування задач регресії скористалися випадковими лісами, екстремальним градієнтним бустінгом та глибокими нейронними мережами. Оптимізацію гіперпараметрів здійснювали за допомогою модуля Нурерорт. Для НМ, на кожному шарі застосовано активаційну функцію ReLU. Також, щоб уникнути перенавчання, скористалися L_2 -регуляризацією та часткою вимкнення нейронів з оптимальним значенням, що складало 0,4. Рання зупинка також поліпшила стійкість моделі. Функція втрат базувалася на методі бінарної крос-ентропії, котрий порівнював

правдиві значення та передбачені властивості і оновлював ваги і зсуви методом зворотного поширення похибки. Мінімум функції втрат обчислено методом градієнтного спуску.

У статті [54] ідентифіковано NiTiHf сплави, якими можна користуватися як актуаторами у космосі. Перевірено 7 методів машинного навчання, і модель, котрою найліпше описано дані, вибрано для визначення нового складу сплаву з попередньо заданою температурою мартенситно-аустенітного перетворення (M_s), термічного гістерезису та виходу роботи. Для розв'язування такої задачі скористалися наступними моделями МН: лінійною регресією, поліноміальною регресією, методом опорних векторів з лінійним ядром, методом опорних векторів з поліноміальним ядром, методом опорних векторів з ядром у вигляді радіальних базисних функцій, методом k найближчих сусідів (KNN) і нейронною мережею (НМ). Застосовано наступний алгоритм. Температуру фазового перетворення (M_s), термічний гістерезис (ТН), та вихід роботи (WO) передбачали відповідними методами МН. Алгоритм розпочинав свою роботу із збору даних та їх попереднього опрацювання. ML_{M_s} навчали, тестували, та перевіряли на першому етапі процесу МН, тобто, ідентифікації нового хімічного складу NiTiHf сплаву. Кількість композицій залежала від вимог користувача і їхнього налаштування. Після того, $ML_{ТН}$ навчали, перевіряли та перевіряли. Хімічний склад, ідентифікований моделлю ML_{M_s} застосовували для передбачення ТН для визначеного хімічного складу. Сплави з більшим ТН проходили на наступний етап, де їх навчали, тестували та перевіряли через ML_{WO} для того, аби визначити WO для матеріалів, відібраних $ML_{ТН}$. Сплави з більшим WO вибрано як кінцеві матеріали. У цьому дослідженні, модель K найближчих сусідів показала найкращі результати у виявленні NiTiHf сплавів із стабільними функціональними властивостями із малими значеннями кореня середньої квадратичної похибки (RMSE). Для M_s RMSE = 5.11, для ТН RMSE = 1.17 і для WO RMSE = 1.21.

У статті [55] запропоновано підхід МН, який спеціально розроблено з огляду на динамічну поведінку СПФ. Цей підхід дозволяє ефективно визначати термодинамічні

параметри СПФ. Запропонований підхід ґрунтується на архітектурі НМ прямого поширення. Після навчання НМ може визначити шукані параметри моделі із циклічних випробувань, які дозволяють визначити діаграми розтягу. Розроблений метод застосовано до дротин з СПФ, і він добре узгоджується з експериментальними даними.

Мета дослідження [56] – з’ясувати, чи аналіз відеоданих у поєднанні з методами МН можна застосовувати для побудови системи прогнозування, котра базується на методах комп’ютерного зору для передбачення сили, котра породжена рухом тіла з СПФ. Встановлено, що відеозахоплення згину тіла, виготовленого із СПФ, методами комп’ютерного зору у модель МН, може передбачати силу активації, згенеровану тілом. Розроблений підхід поєднує комп’ютерний зір та МН для визначення нових матеріалів з СПФ та оцінки сили, котра виникає при русі тіла з СПФ. Відео тіла із СПФ, що рухається, отримано завдяки інфрачервоній цифровій камері, котра дозволяла вимірювати силу. Виміряна сила була правдивим значенням (ground truth) для усіх наступних моделювань. Зміну позиції і форми тіла з СПФ, у порівнянні з його початковою позицією і формою, визначали з кадрів відео. Дані про форму та позицію корелювали з окремо визначеною силою для застосування запропонованого прогнозуючого моделювання. Автори дослідження вибрали підхід обмеженої машини Больцмана разом із алгоритмом класифікації МН для здійснення оцінки. Виділення ознак на основі обмеженої машини Больцмана і алгоритму класифікації, котрий ґрунтується на випадкових лісах, дозволили отримати точність передбачень сили та напружень на рівні 93 %.

У роботі [57] запропоновано глибоку нейронну мережу (ГНМ) для поліпшення планування експериментів електрохімічного виготовлення СПФ. ГНМ, котру застосовано у цьому дослідженні, складалася з чотирьох шарів. Вхідний шар мав 3 нейрони. Перший прихований шар мав 50 нейронів, другий складався із 20 нейронів, а на третьому було 10 нейронів. Кожен шар, за винятком вихідного, мав функцію активації ReLU, а на вихідному шарі скористалися функцією активації Softmax. У

моделі застосовано алгоритм зворотного поширення похибки з коефіцієнтами, визначеними методом градієнтного спуску. Для уникнення неконтрольованого росту похибки досліджували швидкість навчання, яку в результаті встановили рівною 0,001. Також розмір партії встановили рівним 3 і скористалися оптимізатором Adam з правильним вибором напрямку та розміру кроку. Час виготовлення, напругу і міжелектродну відстань подавали на вхід моделі, а розмір отвору та його глибину передбачали за допомогою ГНМ. ГНМ передбачила, що значення були досить точними між 98,6% та 100,6%. Визначено, що ГНМ є більш корисним методом, ніж традиційні підходи. Результати виготовлення спрогнозовано із високою точністю, застосувавши електрохімічне виготовлення та ГНМ до СПФ.

У дослідженні [58] розглянуто роботизовану руку із СПФ. Алгоритм навчання з підсиленням застосовано до згаданої вище руки, активованої СПФ для контролю руху. Розроблена рука може досягнути необхідних параметрів згину і ефективно захоплювати об'єкт у досягнутому зігнутому стані.

У роботі [59] запропоновано метод для моделювання поведінки СПФ, котрий ґрунтується на НМ. Ця НМ дозволяє точно та ефективно прогнозувати переміщення та температуру СПФ. Метод дозволяє забрати сенсор позиціонування, застосовуючи НМ для компенсації нелінійності. Запропонований метод дозволяє передбачити переміщення та температуру. Результати прогнозування показали, що НМ є досить ефективною для моделювання СПФ.

У статті [60] ШІ, котрий складався із комп'ютерного зору та підходів МН, застосовано до автоматизації процесу характеризування СПФ. З'ясовано, що підхід МН, котрий ґрунтується на моделі регресії на основі екстремального градієнтного бустингу, натренований на досить великому наборі даних, досягнув загальної точності передбачень 99%. Розроблена система робить свій внесок в оптимізацію матеріалів СПФ.

У роботі [61] застосовано метод на основі глибинного навчання для дослідження поведінки гіперпружних матеріалів у медицині. ШІ дозволяє прогнозувати

характеристики таких смарт матеріалів, як композити та сендвічі. У дослідженні [62] змодельовано згинальну міцність СПФ. Автори побудували НМ у MATLAB і порівняли результати моделювання з експериментальними даними. Для навчання застосовано алгоритм Левенберга-Марквардта [63], [64], і його результати порівняно із алгоритмом зворотного поширення похибки. Вибрано наступні метрики для порівняння: швидкодія, кореляція регресії (R), і середньоквадратична похибка (MSE).

1.4. Прогнозування властивостей СПФ методами машинного навчання

Прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми (СПФ) базується на поєднанні експериментальних методів, математичного моделювання та сучасних інструментів машинного навчання (МН). Це дозволяє оцінювати довговічність, псевдопружність, демпфуючі характеристики та поведінку матеріалу під циклічними навантаженнями [65].

Основні методи прогнозування можна поділити на чотири частини. До першої належать експериментальні підходи, приміром, випробування на втому та довговічність за циклічного навантаження та змінної амплітуди, а також, вимірювання залишкової деформації, модуля пружності аустеніту, коефіцієнта демпфування. До них також відносяться аналіз розсіяної енергії та відновлюваних деформацій. Другу частину методів складають аналітичні та математичні моделі, такі як, класичні моделі механіки деформівного твердого тіла, моделі фазових переходів (аустенітно-мартенситне перетворення) та варіаційні методи для опису нелінійної поведінки матеріалу. До третьої частини належать числові методи, такі, на зразок методу скінченних елементів (МСЕ), приміром, метод скінченних елементів для моделювання термомеханічних процесів, прогнозування розподілу напружень і деформацій у конструкціях зі СПФ та застосування спеціалізованих програмних пакетів (ANSYS, ABAQUS). Окремий клас становлять методи машинного навчання та інтелектуальний аналіз даних. До них, зокрема, належать побудова моделей на

основі експериментальних даних (регресія, нейронні мережі), застосування алгоритмів оптимізації (BFGS, L-BFGS) для підбору параметрів моделей та інтеграція з системою Orange для швидкого аналізу даних.

У таблиці 1.1. наведено порівняння методів прогнозування функціональних властивостей СПФ.

Таблиця 1.1.

Порівняння методів прогнозування функціональних властивостей СПФ

Метод	Переваги	Недоліки
Експериментальні	Висока точність, реальні дані	Дорогі та тривалі
Аналітичні моделі	Теоретична обґрунтованість	Модель не враховує усі чинники
МСЕ	Детальне моделювання конструкцій	Високі обчислювальні витрати
Методи машинного навчання	Гнучкість, здатність враховувати складні залежності	Потребує достатньо великих масивів даних

Разом з тим, задача прогнозування функціональних СПФ методами машинного навчання досить складна. Так, приміром, циклічне навантаження може призводити до втрати функціональних властивостей СПФ. Також слід відзначити той факт, що температурна залежність фазових переходів ускладнює прогнозування. На додачу, необхідно мати досить великі експериментальні набори даних для навчання моделей машинного навчання, тоді як проведення експериментальних випробувань досить дороговартісне та вимагає наявності відповідного обладнання та підготовлених спеціалістів, котрі здатні таке випробування провести

Тому, для ефективного прогнозування функціональних властивостей СПФ доцільно поєднувати експериментальні дослідження з машинним навчанням. Такий інтегрований підхід дозволяє отримати більш точні результати та підвищити довговічність матеріалів.

1.5. Моделювання довговічності методами машинного навчання

Прогнозування росту втомної тріщини (РВТ) є важливою задачею механіки руйнування, яка надзвичайно актуальна для підтримування надійності та безпеки елементів конструкцій, котрі піддаються дії циклічного навантаження. Такі елементи конструкцій, як авіаційне обладнання, мости, та механічні вироби, часто експлуатуються під дією повторюваних напружень, що може з часом призвести до поширення тріщин, і врешті-решт призвести до потенційного руйнування. Високоточні моделі прогнозування РВТ необхідні для забезпечення вчасних ремонтних робіт, оптимізації проектування конструкції і запобіганню катастрофам у випадку руйнування. Для прогнозування РВТ широко застосовують традиційні, класичні моделі, які ґрунтуються на таких параметрах, як розмах коефіцієнта інтенсивності напружень та довжина тріщини. Однак, експериментальні дані часто володіють певною мірою розкиду, який пояснюється складною природою поведінки матеріалу та зовнішніми чинниками. Саме через це, як наслідок, традиційні моделі можуть не завжди охопити весь діапазон процесу росту тріщини, що призводить до відхилень між передбачуваними та справжніми, дійсними результатами.

За останнє десятиліття методики МН, зокрема НМ, зайняли чільне місце серед наявних методів прогнозування РВТ через свою здатність моделювати складні залежності у великих наборах даних. На відміну від традиційних моделей, НМ враховують різні змінні і автоматично виявляють неочевидні, приховані залежності на основі наявних даних, що робить їх потужними інструментами для прогнозування РВТ. Методи НМ можуть враховувати вплив багатьох чинників, котрі визначають

РВТ, таких, приміром, як коефіцієнт асиметрії циклу навантаження, кількість циклів навантаження, властивості матеріалу і умови середовища. НМ застосовують у багатьох областях науки і техніки, включаючи механіку руйнування [66], [67], [68], [69]. Приміром, у статті [70] запропоновано тришарову штучну нейронну мережу (ШНМ), яка дозволяє прогнозувати довжину втомної тріщини за сталоамплітудного циклічного навантаження. Модель показала вищу точність, ніж традиційні методи, з помилкою прогнозування, яка становила менше, ніж 0,05%. Зокрема, у статті [71] побудовано новий алгоритм на основі ШНМ для оцінки процесів РВТ. У вищезгаданій роботі розроблено модель ШНМ і перевірено її ефективність у прогнозуванні РВТ за різних умов навантаження. У роботі [72] змодельовано РВТ суперсплавів на основі нікелю за допомогою НМ у межах підходів Баєса. У цій статті підкреслено здатність моделі передбачати швидкість РВТ з урахуванням існуючих невизначеностей. У роботі [73] запропоновано інкрементальну схему навчання, котра ґрунтується на повністю з'єднаній НМ, котра дозволяє прогнозувати РВТ у зразках із серединною тріщиною. Побудована модель з легкістю адаптується до різноманітних умов навантаження, таким чином, підсилюючи точність передбачення. У дослідженні [74] порівняно методи випадкових лісів та НМ для прогнозування швидкості РВТ у суперсплавах на основі нікелю. Обидві моделі показали сильні можливості для прогнозування, а НМ забезпечила трохи більший коефіцієнт детермінації ($R^2 = 0,9831$). У статті [75] запропоновано модель РВТ, котра ґрунтується на ШНМ для зразка типу Шарпі з V-подібним надрізом. На додачу, відомо, що НМ активно застосовують у матеріалознавстві, зокрема, у статті [76] спрогнозовано згинальні властивості надрукованих на 3D принтері вуглецево-епоксидних композитів з різними параметрами обробки за допомогою ШНМ та статистичних методів. Також, методи МН застосовано до моделювання термопровідності композитів на основі епоксиду з різними наповнювачами для авіації у статті [77]. У роботі [78] побудовано моделі класифікації поверхневих дефектів сталі за допомогою глибокої НМ. У дослідженні [79] детально розглянуто методи МН, особливо НМ на основі багат шарового

персептрона, для того, аби передбачити частоту навантаження у нікель-титановому СПФ, ґрунтуючись на експериментальних даних випробувань на втому. Особливо у праці [80] показано, що алгоритми МН, зокрема НМ, ефективно та точно передбачають стрибкоподібну поведінку алюмінієвого сплаву АМг6 за повзучості.

1.6. Висновки до розділу 1

У розділі детально та всесторонньо розглянуто та проаналізовано сплави з пам'яттю форми, методи машинного навчання та їх застосування до моделювання різних властивостей СПФ.

Перевагою застосування таких моделей є те, що у деяких випадках вони дозволяють уникнути проведення прямого експерименту за умови наявності достатньої кількості даних. Експериментальні дослідження часто є досить дорогавартнісними і вимагають великої кількості людської праці, дорогого лабораторного обладнання та часу.

У якості недоліків цих моделей, часом їх не дуже можна пояснити і у деяких випадках вони діють за принципом чорної коробки. Загалом, тип моделі МН, який є найкращим для певної попередньо вибраної метрики, значно залежить від набору даних і задачі, котру розв'язують.

Аналіз літератури показує, що ефективність алгоритмів машинного навчання суттєво залежить від структури даних та постановки задачі. У різних дослідженнях найкращі результати демонструють різні алгоритми, зокрема нейронні мережі, метод k найближчих сусідів або метод опорних векторів. Загалом, методи МН і ШІ є досить перспективними і багатообіцяючими і є потужними інструментами моделювання властивостей СПФ.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА ПРОГНОЗУВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПФ МАШИНИМ НАВЧАННЯМ

2.1. Система аналізу даних Orange

Orange Data Mining – безкоштовна платформа з відкритим вихідним кодом для інтелектуального аналізу даних, машинного навчання та візуалізації, яка працює за принципом візуального програмування (рис. 2.1) [81].



Рис. 2.1. Можливості системи Orange

Основні можливості та переваги:

- Візуальне програмування: Замість написання коду користувач створює схеми (workflows), з'єднуючи різні інтерактивні візуальні блоки (віджети) [82].

- Інтерактивна візуалізація: Ви можете створювати графіки, гистограми та дерева прийняття рішень, де вибір даних на одному графіку автоматично оновлює інші блоки [81].

- Машинне навчання: Платформа підтримує класифікацію, регресію, кластеризацію та асоціативні правила [82], [83].

- Розширюваність: Завдяки додатковим плагінам Orange можна скористатися для аналізу тексту (Text Mining), біоінформатики та мережевого аналізу [81].

- Потенційні обмеження:

1) Менша гнучкість у порівнянні з чистим Python чи R.

2) Візуальні сценарії можуть бути складними для масштабних проєктів.

3) Обмежена інтеграція з деякими сучасними ML-фреймворками.

Для кого вона підходить:

- Початківці: Ідеально для навчання основам Data Science без знання Python та необхідності писати код [83].

- Дослідники та аналітики: Дозволяє швидко перевірити гіпотези та візуалізувати складні набори даних [81].

- Викладачі: Orange активно користуються в університетах для наочної демонстрації алгоритмів машинного навчання [81].

Як почати роботу:

1) Завантаження: Програма доступна для Windows, macOS та Linux на офіційному сайті Orange.

2) Навчання: Для швидкого старту можна переглянути відеоуроки на YouTube-каналі Orange, які пояснюють базові принципи роботи з віджетами.

3) Документація: Детальні інструкції до кожного інструменту доступні в офіційній документації Orange.

Програма написана на Python, тому досвідчені користувачі можуть створювати власні віджети або інтегрувати скрипти безпосередньо в інтерфейс [81], [82].

2.2. Попередня обробка даних

Дані, котрі отримали з журналів випробувань, перетворювали у формат CSV, тобто, формат файлів, у яких значення розділено комою (,). В якості розділювача може слугувати й інший символ, приміром, крапка з комою (;). Такий формат файлу є де-факто стандартом для задач, у яких застосовують методи машинного навчання.

Експериментальні дані, отримані за результатами випробувань, попередньо обробляли для того, аби підвищити точність прогнозування. Так, приміром, дані перетворювали до сегменту $[0,1]$, користуючись відповідною формулою:

$$x_{scaled} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}, \quad (2.1)$$

де x – елемент вибірки, x_{max} та x_{min} – найбільший та найменший елемент вибірки, відповідно. Тут під вибіркою розуміємо певну числову ознаку.

Таке перетворення володіє наступними перевагами. По-перше, воно є інтуїтивно зрозумілим, і його досить просто реалізувати на довільній вибраній мові програмування. По-друге, дане перетворення зберігає відношення між елементами вибірки.

Однак наведене вище перетворення має певні обмеження. Так, воно є доволі чутливим до викидів, тобто навіть один викид може значно вплинути на результат перетворення. Також це перетворення суттєво залежить від даних. Якщо нові дані потрапляють за межі початкового діапазону, тобто менші за найменший елемент вибірки або більші за найбільший, то потрібно відповідно застосувати згадане вище перетворення до нових даних знову.

Таке перетворення корисне тоді, коли ознаки мають різний діапазон, однак очікується, що вони здійснюють рівномірний внесок у модель. Також його варто застосовувати тоді, коли ознаки мають знаходитися у певному діапазоні для того, аби

алгоритми машинного навчання працювали коректно. Це особливо важливо для нейронних мереж.

2.3. Аугментація набору даних

Дані, котрі отримали в результаті попередньої обробки, зазвичай містили доволі обмежену кількість елементів. Це, своєю чергою, могло викликати певні труднощі для алгоритмів машинного навчання. Тому перед тим, як подавати набори даних на вхід певних методів машинного навчання, їх додатково аугментували, тобто збільшували набір даних. Цей процес здійснювали різними методами, приміром, методом кубічних сплайнів, а також методами Akima та makima.

Розглянемо детальніше кожен з наведених вище методів.

Кубічні сплайни є кусково-неперервними поліномами третього порядку, котрими користуються для гладкої інтерполяції даних. Такий алгоритм забезпечує неперервні похідні першого та другого порядків у з'єднуючих точках, котрі називають вузлами інтерполяції. Даний метод інтерполювання досить гнучкий, при цьому природні сплайни підбирають так, аби друга похідна на кінцях відрізків оберталася в нуль. Перевагою кубічних сплайнів є те, що вони мають низький степінь і досить добре моделюють нелінійні дані без осциляцій, котрі зустрічають у многочленах вищого степеня [84].

Метод інтерполяції Akima – спосіб побудови гладкої кривої (кубічного сплайна), що проходить точно через задані точки, але, на відміну від звичайних сплайнів, мінімізує небажані коливання (осциляції) між ними. Він локальний, тобто кожна точка впливає лише на сусідню область, що забезпечує швидкі обчислювання [85]. Даний метод враховує швидкий ріст функції та показує досить добрі результати.

Метод інтерполяції makima (modified Akima) – алгоритм побудови гладкої кривої, що проходить точно через задані точки, об'єднуючи переваги кубічних сплайнів та методу Akima [86]. Він будує гладкі криві, уникаючи різких коливань

(осциляцій), характерних для поліноміальної інтерполяції, і забезпечує стійкість до викидів, що робить його кращим за традиційні сплайни у випадку нерівномірних даних.

2.4. Методика моделювання функціональних властивостей СПФ

Методику прогнозування функціональних властивостей СПФ зображено на рис. 2.2.

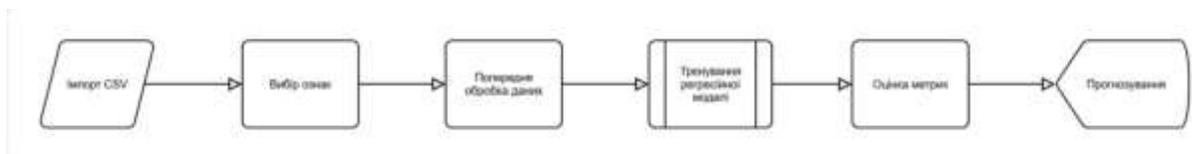


Рис. 2.2. Схема моделювання функціональних властивостей СПФ

Розглянемо детально дану схему. Спершу, дані з csv файлів необхідно завантажити у програмний комплекс Orange. На наступному кроці, потрібно вибрати вхідні та вихідні ознаки. Після цього здійснюється попередня обробка даних. У даній роботі користувалися перетворенням до діапазону $[0,1]$. Далі на основі обраних моделей машинного навчання здійснюється тренування відповідного регресора. Після цього оцінюються певні метрики, а вже на останньому кроці здійснюється прогнозування моделі.

Вибірка містилася у текстових файлах з розширенням CSV. Віджет CSV File Import дозволяє імпортувати вхідний файл.

На рис. 2.3 зображено вікно з програмного комплексу Orange, користуючись яким можна імпортувати CSV файл. Для цього необхідно задати шлях в операційній системі до файлу, який хочемо імпортувати.

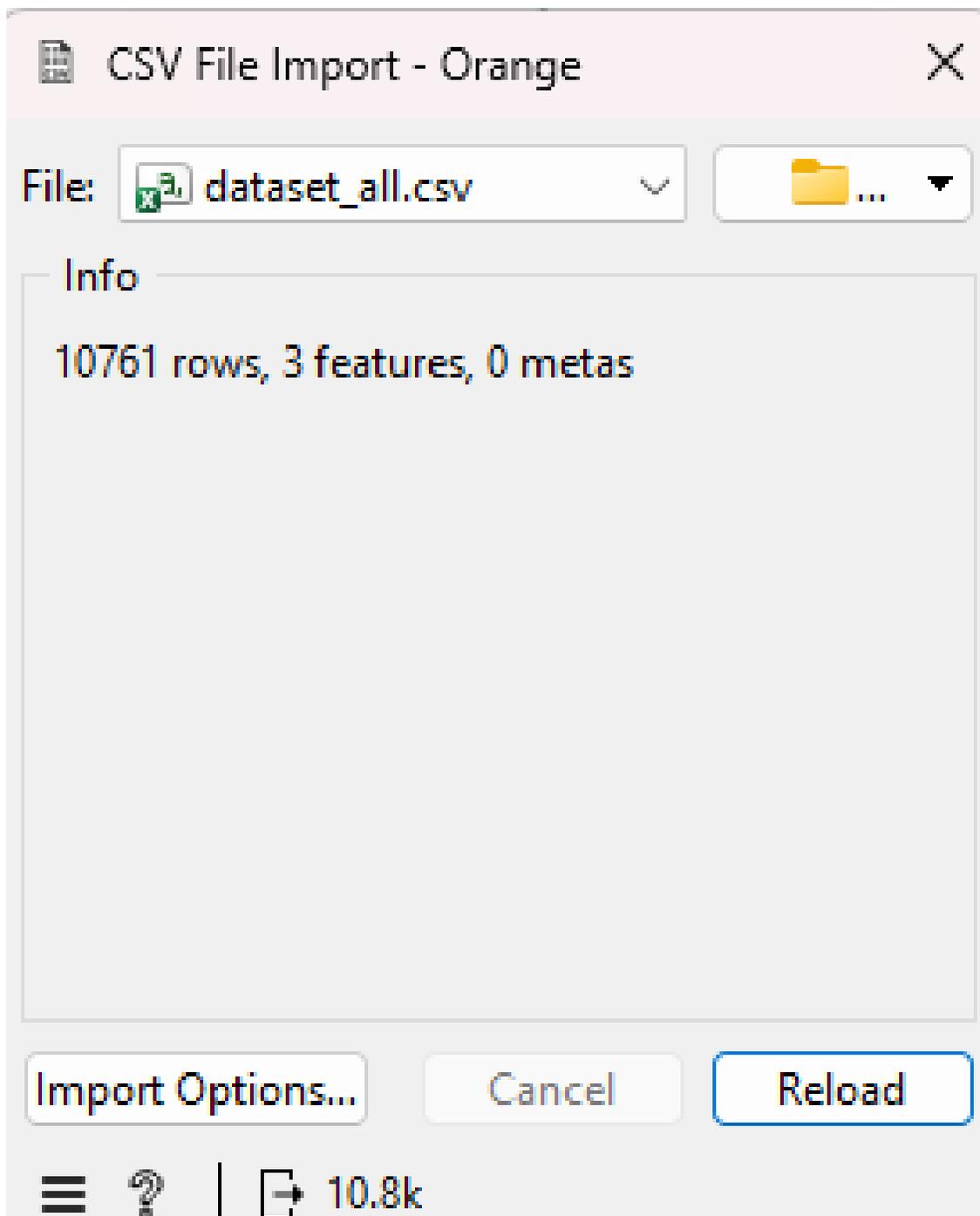


Рис. 2.3. Приклад діалогового вікна імпортування файлу CSV

На рис. 2.4. наведено опції імпорту файлу CSV у програмному комплексі Orange. З першого випадаючого списку можемо обрати відповідне кодування символів. Далі вибираємо розділювач даних, у даному випадку за розділювач вибрано кому. Далі вибирають символ цитування, у даному випадку це подвійні лапки. Далі маємо справу

із розділювачем цілої та дробової частини числа. У даному випадку це крапка (.). Далі знаходяться стовпчики із ознаками та їх значеннями.

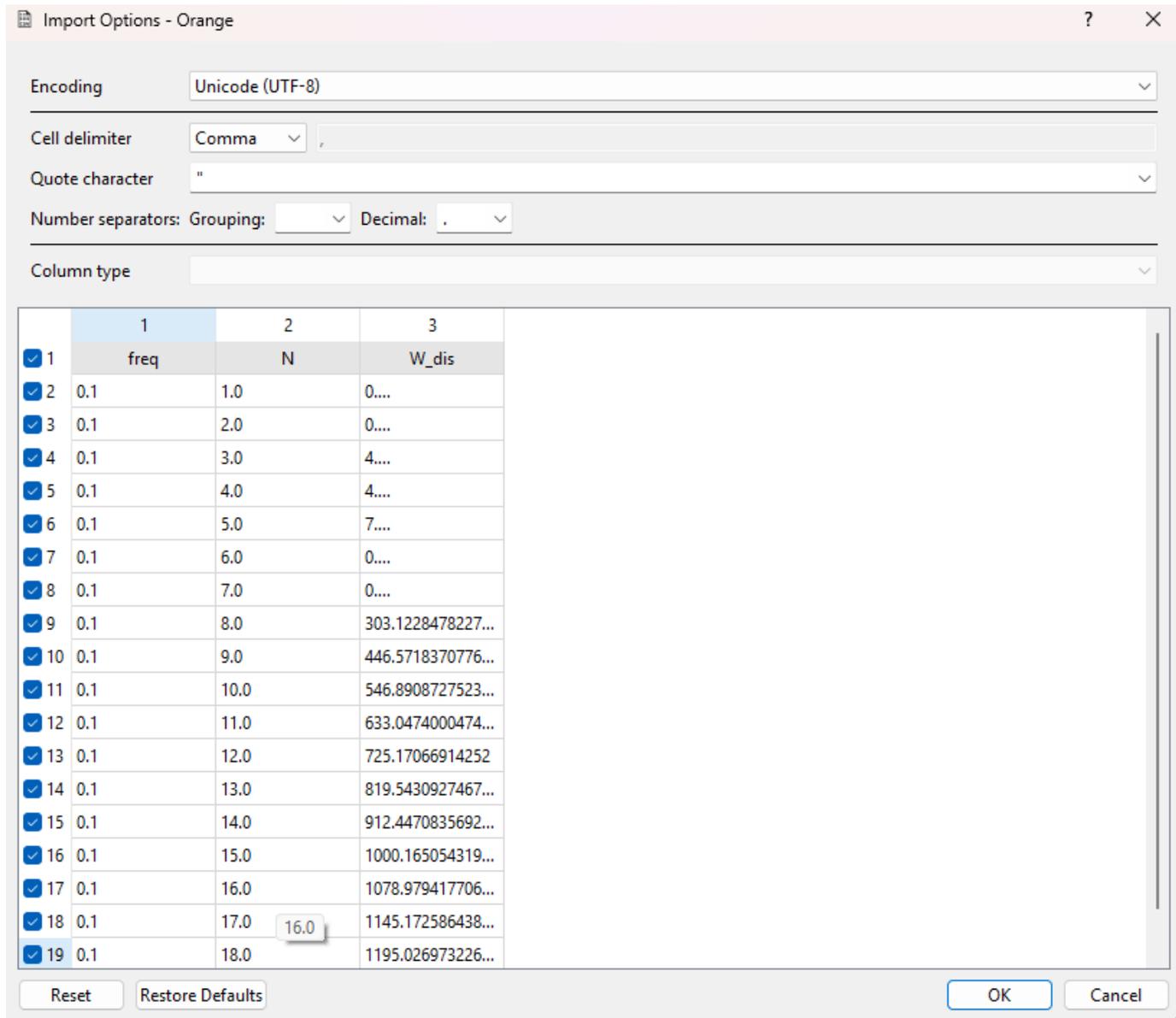


Рис. 2.4. Опції імпорту файла CSV

На рис. 2.5. наведено вікно вибору вхідної та вихідної ознак. На даному рисунку вибрано дві змінні за вхідні, а одну за вихідну.

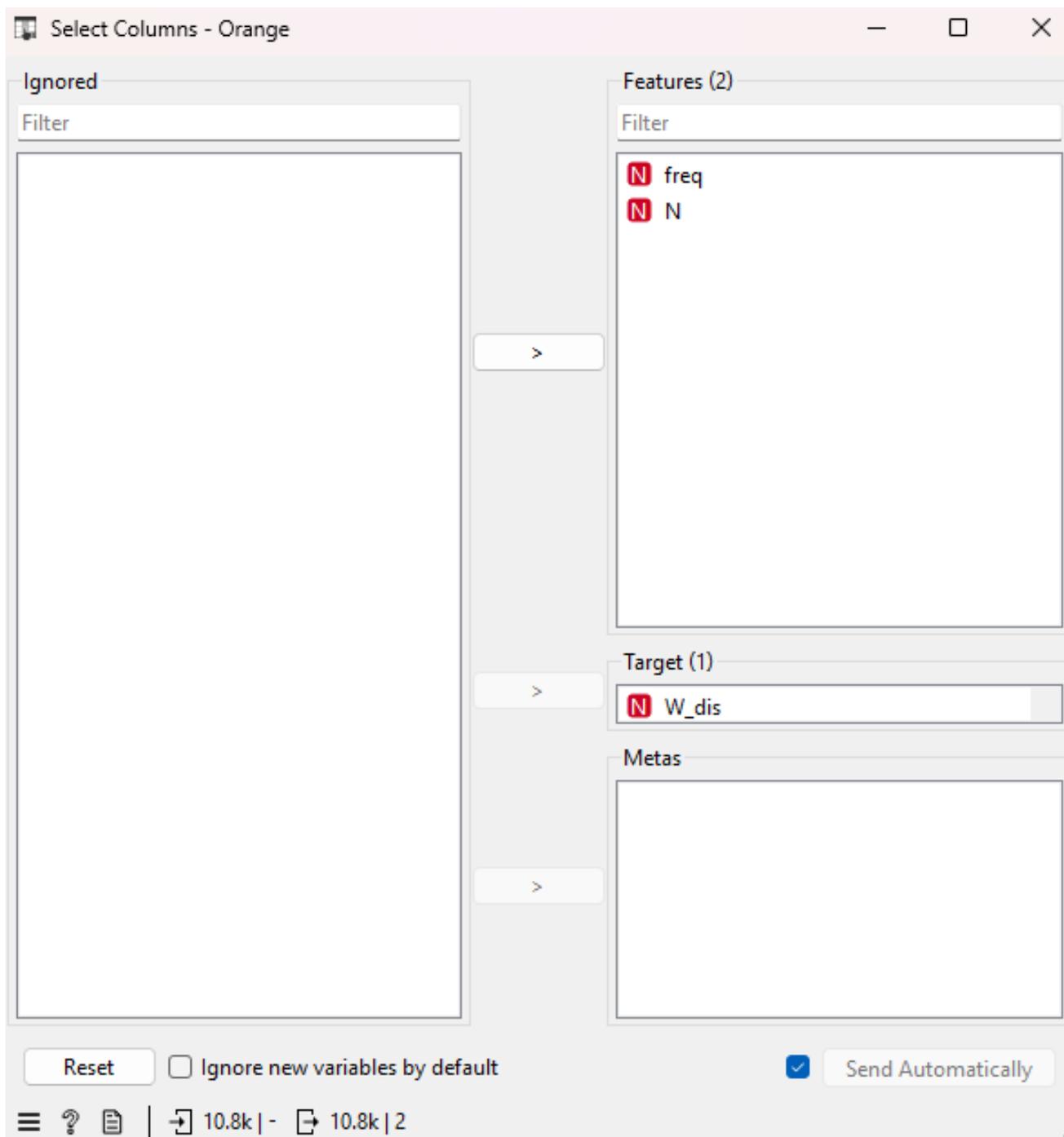


Рис. 2.5. Діалогове вікно вибору вхідної та вихідної ознак

На рис. 2.6. наведено вікно попередньої обробки даних. Серед доступних варіантів нормалізації ознак, вибираємо нормалізацію до інтервалу $[0, 1]$.

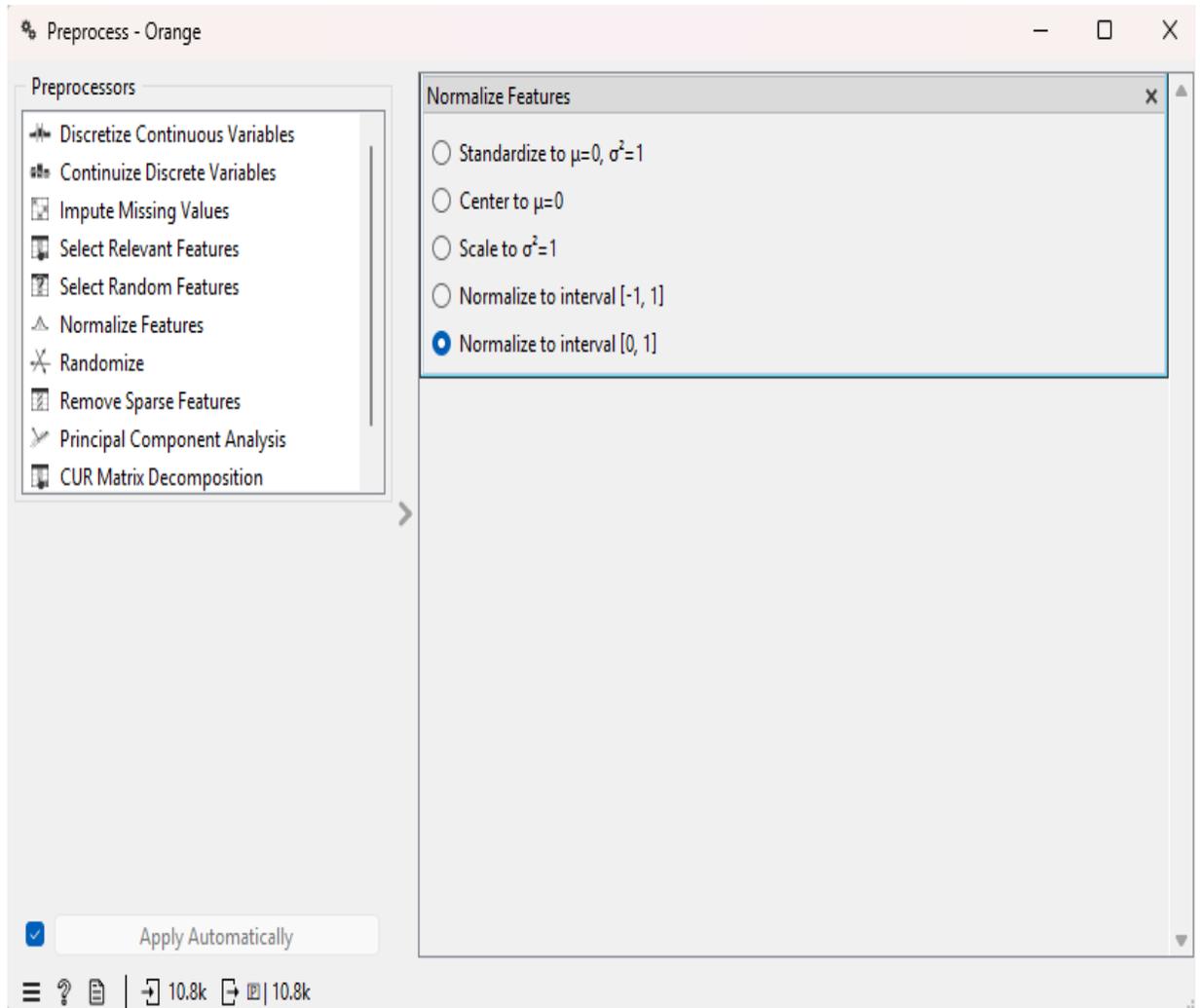


Рис. 2.6. Вікно попередньої обробки даних

На рис. 2.7. наведено вікно налаштування методу випадкових лісів. Тут задаємо кількість дерев, кількість атрибутів, котрі розглядають на кожному розділенні, реплікабельність, тобто відтворюваність навчання, яка є булевою змінною, тобто прапорцем (Так/Ні), балансування розподілу класів (Так/Ні), а також параметри, які стосуються росту дерев, на зразок: обмежувати глибину індивідуальних дерев, і не розділяти на підмножини, менші ніж задане число, у даному випадку 5.

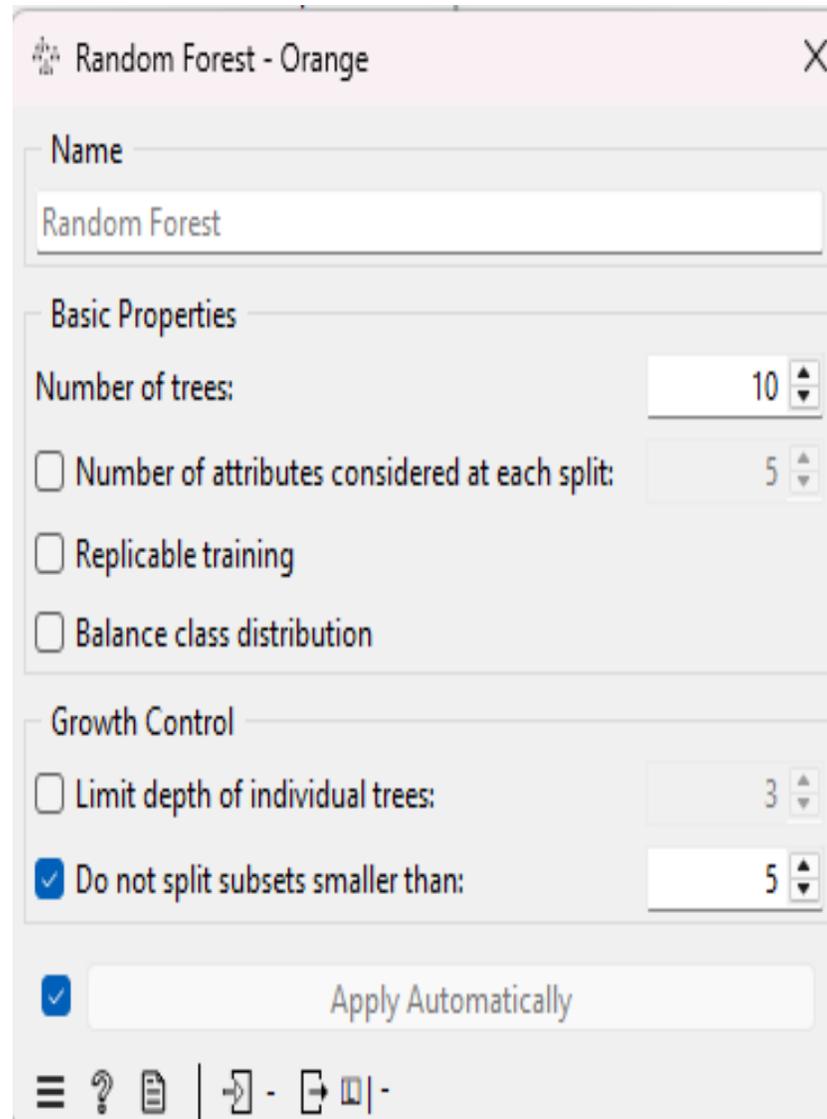


Рис. 2.7. Вікно налаштування методу випадкових лісів

2.5. Основні метрики методів машинного навчання

Для кількісної оцінки точності та якості моделей машинного навчання скористалися декількома стандартними метриками помилок: середньою абсолютною помилкою (MAE), середньою квадратичною помилкою (MSE), коренем квадратним із середньої квадратичної помилки (RMSE) та коефіцієнтом детермінації (R^2). Ці метрики дозволяють отримати більш надійну та об'єктивну характеристику точності моделі. Кожна із згаданих вище метрик відображає різні аспекти якості

прогнозування, а саме: точність у фізичних одиницях вимірювання, стабільність, помилку у тих самих одиницях, що й вихідна змінна, та здатність моделі пояснити варіацію даних. Такий підхід дозволяє усебічно збільшити надійність висновків про ефективність кожного методу.

Середня абсолютна помилка (MAE): середнє значення модуля різниці між прогнозованим значенням і актуальним значенням:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_{true}^{test}(i) - y_{pred}^{test}(i)|, \quad (2.2)$$

де $y_{true}^{test}(i)$ - експериментальне значення i -того елемента тестової вибірки; $y_{pred}^{test}(i)$ - прогнозоване значення i -того елемента тестової вибірки; n – обсяг тестової вибірки.

Середня квадратична помилка (MSE): середнє значення квадрата різниці між прогнозованим та актуальним значенням:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{true}^{test}(i) - y_{pred}^{test}(i))^2, \quad (2.3)$$

Корінь квадратний із середньої квадратичної помилки (RMSE): корінь квадратний із середнього значення квадрата різниці між прогнозованим та актуальним значенням:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{true}^{test}(i) - y_{pred}^{test}(i))^2}, \quad (2.4)$$

Коефіцієнт детермінації R^2 : показник, який відображає частку варіанси залежної змінної, котру пояснює модель. Його обчислюють за наступною формулою:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{true}^{test}(i) - y_{pred}^{test}(i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_{true}^{test}(i) - \bar{y}_{pred}^{test})^2}, \quad (2.5)$$

де \bar{y}_{pred}^{test} - середнє значення експериментальних даних:

$$\bar{y}_{pred}^{test} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_{pred}^{test}(i). \quad (2.6)$$

2.6. Методи машинного навчання

Машинне навчання (МН) є складовою частиною методів штучного інтелекту (ШІ). Воно дозволяє вчитися на основі даних і покращуватися з часом без потреби у програмуванні цих методів. Методи МН дозволяють визначати закономірності з наявних наборів даних і, ґрунтуючись на них, здійснювати прогнозування або приймати певні рішення.

За останні десятиліття, машинне навчання стало одним із основних трендів інформаційних технологій та невід'ємною частиною повсякденного життя. Кількість інформації невинно зростає за експоненціальним законом, і виникає потреба її аналізу для того, аби отримати приховані та неочевидні залежності між даними [87].

Машинне навчання знаходить своє застосування у різних галузях науки і техніки. Воно є набором алгоритмів, які дозволяють зрозуміти дані та їхню природу [88]. Загалом ці алгоритми поділяють на методи навчання з учителем та без нього. Взагалі кажучи, методи машинного навчання з учителем базуються на побудові статистичної моделі для передбачення, або оцінки, вихідної змінної на основі принаймні однієї ознаки (вхідної змінної) Такого роду задачі виникають у бізнесі, медицині, фінансах, психології, інженерії та інших галузях людської діяльності. На противагу, для алгоритмів машинного навчання без учителя є вхідні змінні, або

ознаки, але немає розміченої вихідної змінної. Однак, у цьому випадку можливо вивчити залежності і структуру з даних такого вигляду. Розглянемо деякі приклади застосування методів машинного навчання на основі певних наборів даних.

Компанії застосовують МН для автоматизації, прийняття розумних рішень і отримання цінних неочевидних висновків.

Методи МН повсюдно застосовують у медицині та медичній діагностиці. Алгоритми МН здатні аналізувати великі обсяги даних пацієнтів, медичні скани та генетичну інформацію для того, аби допомогти діагностувати певне захворювання та визначити адекватне лікування. Методи МН дозволяють визначити певну хворобу, наприклад, таку, як рак, пневмонія, та паркінсонізм, на основі наявних медичних знімків. Такі алгоритми часто показують точність, співмірну із тією, яку досягають лікарі, або у деяких випадках навіть перевищує лікарську. Аналізуючи медичні записи пацієнтів та їх симптоми, моделі можуть передбачити ризик певних захворювань або можливі ускладнення [89].

Синтез ліків. Методи МН пришвидшують процес створення ліків, передбачаючи, як взаємодітимуть різні їх складові, таким чином, заощаджуючи час і витрати на проведення досліджень.

Також алгоритми МН знаходять своє застосування у розумних помічниках та людській та машинній взаємодії. Так, віртуальні асистенти базуються на обробці природної мови та розпізнаванні мови для того, аби зрозуміти команди і відповідати розумно.

Приміром, такі голосові помічники, як Siri, Alexa та Google Assistant перетворюють розмовну мову у певні команди. Також, МН дозволяє користувачам виконувати веб-пошук без застосування явного введення з клавіатури і отримувати транскрибований текст під час зустрічей або телефонних дзвінків. Бізнеси користуються чатботами на основі ШІ для цілодобової підтримки користувачів, які дозволяють відповідати на запити швидше та з більшою ефективністю.

Методи МН успішно дозволяють надавати персоналізовані рекомендації та поліпшувати користувацький досвід. Сучасні цифрові платформи застосовують персоналізацію, котра ґрунтується на рекомендаційних системах. Моделі МН аналізують поведінку користувачів для того, аби доставляти релевантний контент, покращувати залучення користувачів та їх загальне задоволення [89].

Потокові платформи. Netflix та Spotify пропонують фільми для перегляду та музичні композиції, базуючись на основі переглядів користувачів та їх музичних вподобаннях [89].

E-commerce. Сайти на кшталт Amazon рекомендують продукти, спеціально припасовані до Ваших смаків, закономірностей перегляду і минулих покупок [89].

Соціальні медіа. Алгоритми налаштовують стрічки з контентом, впорядковують пости відповідно до пріоритетів і пропонують друзів або сторінки [89].

Визначення шахрайства та фінансове передбачення. У фінансах, величезні суми коштів рухаються у вигляді чисел і МН відіграє важливу роль у визначенні шахрайства та аналізі ринку [89].

Моніторинг транзакцій. Банки застосовують моделі МН для того, аби визначати незвичну поведінку при витратах і позначати підозрілі транзакції [89].

Оцінка повернення позик. Моделі кредитного скорингу аналізують профілі користувачів і передбачають ймовірність дефолту [89].

Передбачення фондового ринку. Методи МН застосовують для аналізу часових рядів цін акцій і прогнозування рухів ціни. Фондові ринки є досить складними системами, а алгоритмічний трейдинг користується цими прогнозами для кращого прийняття рішень [89].

Автономні транспортні засоби та розумна мобільність. Автомобілі, які пересуваються без водія, користуються методами МН для того, аби зрозуміти своє середовище, безпечно рухатися і приймати негайні рішення [89].

Ключові компоненти таких систем.

Комп'ютерний зір. Розрізняє смуги, пішоходів, сигнали світлофорів і перешкоди.

Набір сенсорів. Поєднує дані з камер, лідарів та радара для 360 градусного обзору.

Оцінка поведінки. Передбачає, як інші водії чи пішоходи можуть діяти.

Автономні транспортні засоби можуть оперувати з мінімальним людським втручанням. Окрім автомобілів, МН також застосовується в оптимізації трафіку, розумних навігаційних системах і передбачуваній підтримці при транспортуванні [89].

2.6.1. Метод k найближчих сусідів

Метод k найближчих сусідів (k NN) є доволі простим і водночас надійним алгоритмом розв'язування задачі регресії та класифікації. Він розв'язує вищезгадані задачі, користуючись мірою подібності. Цей алгоритм належить до сімейства непараметричних методів [90].

Даний алгоритм ґрунтується на відстані від точки до своїх k найближчих сусідів у тренувальній вибірці.

Ідея методу k найближчих сусідів наступна. Вона полягає у припущенні, що схожі точки знаходяться недалеко одна від одної.

Кроки алгоритму [91]:.

1) Вибрати k – натуральне число, часто мале і непарне, для того, аби уникнути неоднозначності.

2) Обчислити відстань, зазвичай Евклідову, між новими точками і всіма точками тренувальної вибірки.

3) Визначити сусідів, тобто, знайти k найближчих точок.

4) Спрогнозувати результат. У задачі класифікації точці присвоюють найбільш розповсюджений клас поміж k сусідів. У задачі регресії прогнозоване значення обчислюють як середнє з поміж k сусідів.

Ключові характеристики алгоритму наступні. По-перше, такий алгоритм є методом машинного навчання з учителем, тобто, він потребує розмічених даних. По-друге, цей метод є непараметричним, тобто, не здійснено припущення стосовно будь-якого розподілу даних. По-третє, алгоритм не вимагає фази навчання, оскільки модель зберігає дані і обчислює прогнозований результат на вимогу. По-четверте, такий метод є чутливим до відстаней. Тобто, масштабування ознак є необхідним для того, аби забезпечити правильні обчислення відстаней.

Алгоритм k найближчих сусідів широко застосовують у різних галузях. Приміром, у медицині ним користуються для передбачення ризику таких захворювань, як рак або серцеві напади. У фінансах ним передбачають потенційні банкрутства та оцінку ризиків. В електронній комерції, алгоритм застосовують для рекомендаційних систем. Також даний алгоритм досить точно класифікує образи та написані від руки літери.

Зазвичай користуються наступними метриками відстані: Евклідова відстань, Манхеттенська відстань, Косинусна подібність, Мінковського. Вибір метрики значно впливає на результат.

Стосовно параметру k , то тут виходять із таких міркувань. Мале k , приміром, 1–3, призводить до того, що алгоритм стає чутливим до шуму. На противагу цьому, велике k згладжує вплив шуму, однак може втратити локальні особливості. На практиці, оптимальне k часто підбирають експериментально, наприклад, таким методом, як крос-валідація.

Алгоритм k найближчих сусідів базується на порівнянні відомих елементів із новими. Його базовою ідеєю є те, що новий об'єкт, яким потрібно спрогнозувати, найбільш поширений між k найближчими сусідами навчальної вибірки. Переважно відстань між k найближчими сусідами вибирають Евклідовою. Цей алгоритм належить до методів навчання з учителем, тому він вимагає розміченого набору даних. Для того, аби здійснити аналіз алгоритму k найближчих сусідів, розглянемо задачу класифікації нового об'єкта, тобто точки запиту, між іншими відомими

екземплярами. Цей процес проілюстровано на рис. 2.8. [92], на якому зображено екземпляри із знаками плюс та мінус і точку запиту, позначену голубим трикутником. Завдання алгоритму наступне: оцінити, тобто класифікувати, результат точки запиту, ґрунтуючись на вибраній кількості її k найближчих сусідів. Іншими словами, потрібно визначити, чи точку запиту можна класифікувати або із знаком плюс або із знаком мінус.

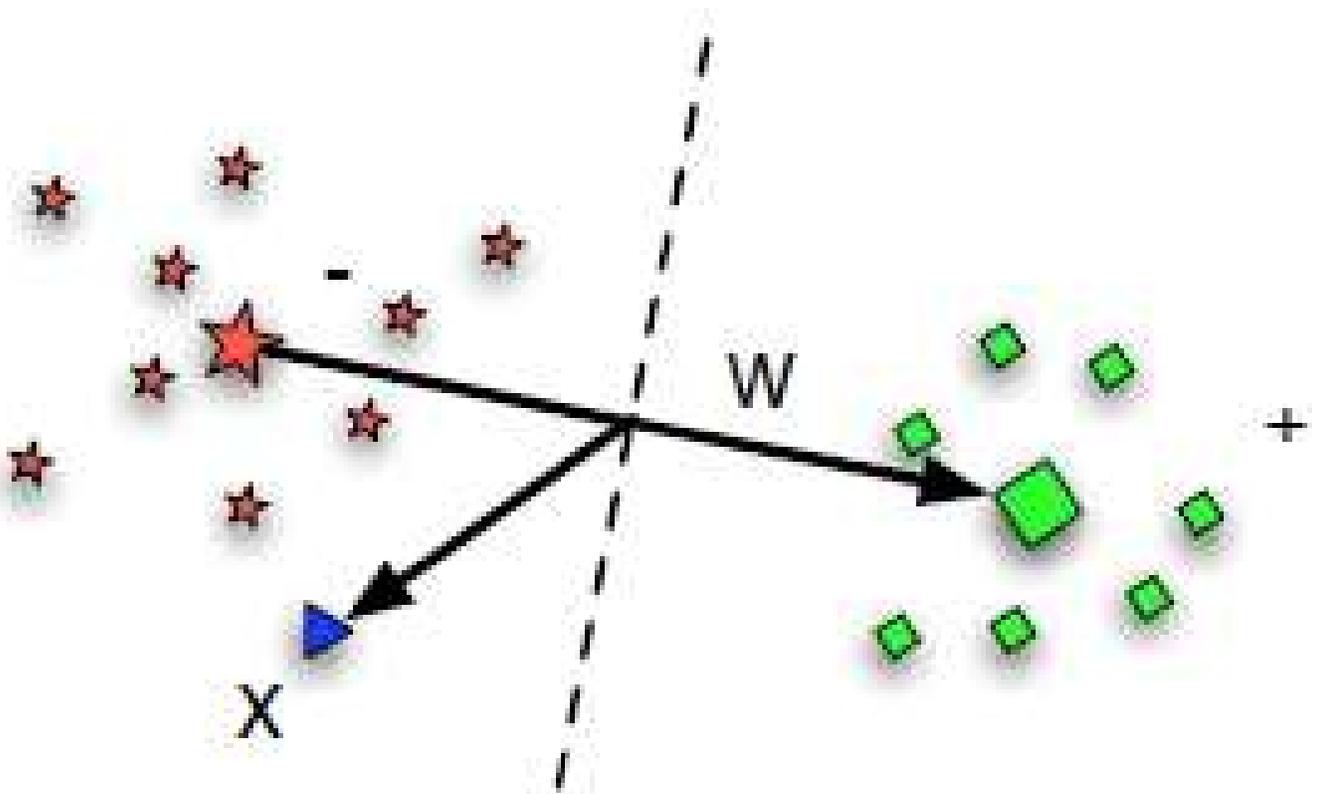


Рис. 2.8. Приклади даних із знаками плюс та мінус і точки запиту, позначеної голубим трикутником [92]

Розглянемо результат класифікації методом k найближчих сусідів, ґрунтуючись на одному найближчому сусіді. У цьому випадку, метод k найближчих сусідів

передбачить результат точки запиту із знаком мінус, оскільки найближча точка має знак мінус.

Задачі регресії зазвичай пов'язані із передбаченням результату залежної змінної, на наборі незалежних змінних. Результат точки запиту обчислюють як усереднене результатів їх сусідів.

Метод k найближчих сусідів є методом, що ґрунтується на моделі з пам'яттю, які відомі як екземпляри, для яких результати відомі, тобто, існують відповідні мітки.

Кожен екземпляр складається з точки даних, котра містить набір незалежних значень, котрі промарковано множиною залежної змінної. Залежні та незалежні змінні можуть бути або неперервними, або категоріальними. Для неперервних залежних змінних, розв'язують задачу регресії, в іншому випадку, мають справу із задачею класифікації. Таким чином, метод може успішно застосуватися для розв'язування як задачі регресії, так і задачі класифікації.

Маючи справу із новою точкою даних, яку ще називають точкою запиту, маємо оцінити кінцевий результат, ґрунтуючись на екземплярах k найближчих сусідів. Це можна досягнути наступним чином. Потрібно знайти k екземплярів, які є найближчими до точки запиту, тобто, k найближчих сусідів. Для задачі регресії, результати прогнозування методом k найближчих сусідів базуються на усередненні результатів k найближчих сусідів, для задач класифікації застосовують голосування більшості.

Крос-валідація є широко застосовуваною методологією, якою можна скористатися для того, аби оцінити невідомі параметри моделі. Розглянемо можливість застосовувати цю методологію для оцінки параметра k .

Загальною ідеєю вищезгаданого методу є поділити набір даних на ν частин (випадково вибраних навчальної та тестової вибірок). Для фіксованого значення k , застосовуємо модель методу k найближчих сусідів для прогнозування на сегменті ν , тобто користуємося $\nu-1$ сегментом як прикладами і оцінюємо помилку. Найбільш загальним вибором для помилки регресії є сума квадратів, а для класифікації зазвичай

вибирають точність, тобто, відсоток правильно класифікованих випадків. Такий обчислювальний процес послідовно застосовують для усіх можливих значень v . В кінці v згортки, помилки обчислень усереднюють для того, аби виміряти стабільність моделі, тобто, як модель передбачає точки запиту. Наведені вище кроки повторюють для різних k , і значення, на якому досягається найнижча помилка (або найбільша точність класифікації), вибирають як оптимальне значення для k , тобто оптимальне у сенсі крос-валідації.

Зауважимо, що крос-валідація є обчислювально затратною, тобто, необхідно дозволити алгоритму виконуватися достатньо часу, особливо у випадку, коли розмір вибірки є досить великим. Також, можна безпосередньо задати значення параметра k . Це може бути достатньо виваженим рішенням тоді, коли відомо, яке значення параметра k вибрати. Приміром, таке значення можна взяти із попереднього аналізу схожих даних методом k найближчих сусідів.

Як згадано вище, для даної точки запиту, метод k найближчих сусідів здійснює прогнозування, базуючись на результаті k найближчих сусідів, найближчих до заданої точки. Таким чином, для того, аби здійснити передбачення на основі методу k найближчих сусідів, потрібно визначити метрику, для того, щоб виміряти відстань між точкою запиту та елементами вибірки.

Після вибору значення k , можна прогнозувати, базуючись на елементах k найближчих сусідів. Для регресії, передбачення методом k найближчих сусідів є середнім значенням результату методу k найближчих сусідів.

$$Y = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K y_i, \quad (2.7)$$

де y_i є i -тим елементом вибірки, а Y – це результат передбачення для точки запиту. На противагу регресії, у задачах класифікації, прогнозування методом k

найближчих сусідів ґрунтується на голосуванні, у якому переможець присвоює мітку точці запиту.

Оскільки передбачення методом k найближчих сусідів базується на інтуїтивному припущенні, що близькі з огляду на відстань об'єкти потенційно схожі, варто виділяти k найближчих сусідів при здійсненні прогнозування. Надамо найближчим точкам серед k найближчих сусідів більшу вагу голосу на результат точки запиту. Це можна досягнути, впровадивши набір ваг W , тобто, по одній вазі для кожного найближчого сусіда, визначену на основі відносної близькості кожного сусіда стосовно точки запиту. Таким чином:

$$W(x, p_i) = \frac{\exp(-D(x, p_i))}{\sum_{i=1}^K \exp(-D(x, p_i))}, \quad (2.8)$$

де $D(x, p_i)$ – відстань між точкою запиту x та i -тим елементом p_i вибірки.

Ваги, визначені у такий спосіб, задовольнятимуть рівність:

$$\sum_{i=1}^K W(x_w, x_i) = 1. \quad (2.9)$$

Отже, для задач регресії, отримуємо наступну формулу:

$$y = \sum_{i=1}^K W(x_w, x_i) y_i. \quad (2.10)$$

Для задач класифікації, вибирають максимум з наведеного вище рівняння для кожної змінної класу.

Очевидно, що при $k > 1$, природним чином отримуємо стандартну відхилення при розв'язуванні задачі регресії, користуючись:

$$error_bar = \pm \sqrt{\frac{1}{K-1} \sum_{i=1}^K (y - y_i)^2} . \quad (2.11)$$

2.6.2. Метод опорних векторів

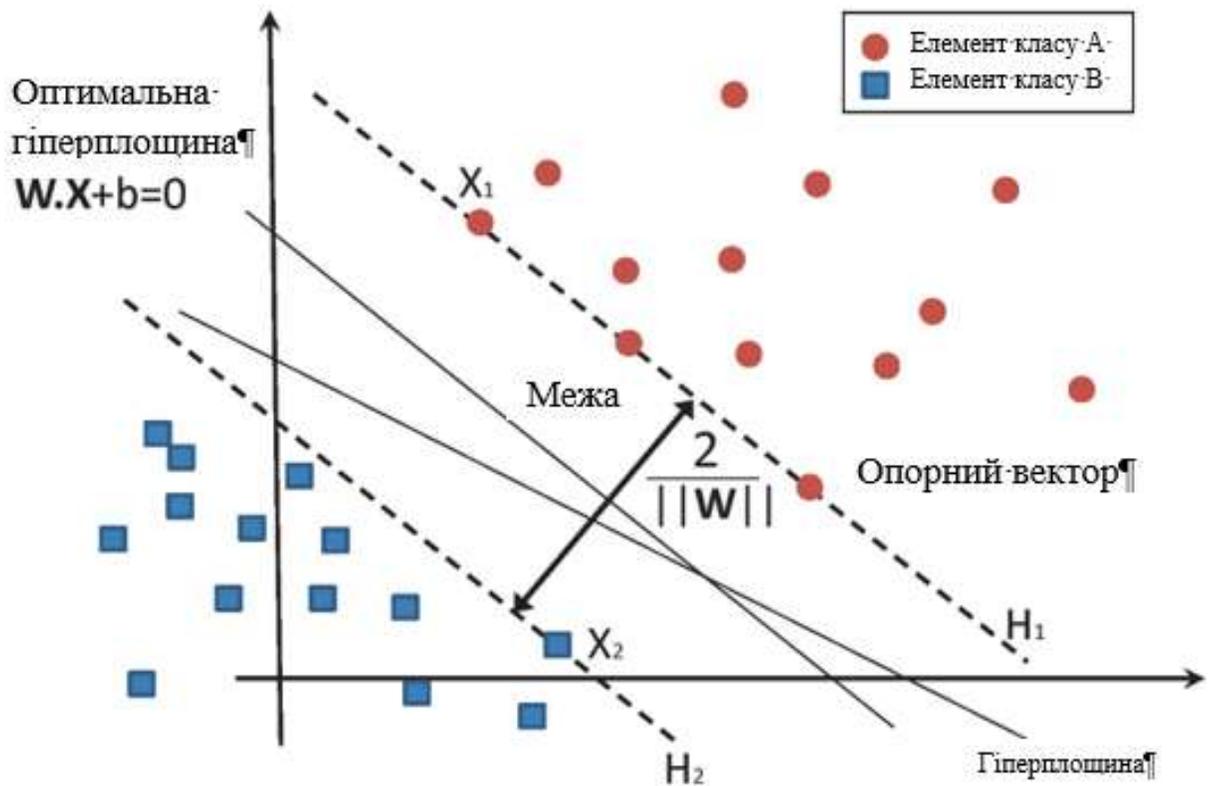
Метод опорних векторів (SVM) – алгоритм, котрий ґрунтується на індуктивному принципі мінімізації структурного ризику. Він добре зарекомендував себе на вибірках малого розміру. Алгоритм базується на спробі мінімізувати емпіричний ризик і розмірність Вапніка-Червоненкіса. Вапнік та його колеги у лабораторії AT&T Bell запропонували та розвинули дані методи. Алгоритм SVM дозволяє знаходити приховані, неявні залежності у складних наборах даних [93].

SVM застосовують як для розв'язування задач класифікації, так і регресії. Основна ідея методу полягає у побудові оптимальної розділяючої межі, котру називають гіперплощиною, яка найкраще розділяє точки вибірки, котрі належать до різних класів.

Алгоритм SVM працює наступним чином. Він будує гіперплощину. У двовимірному просторі це просто лінія; у вищих вимірах вона перетворюється на площину або гіперплощину. Межею називають відстань між гіперплощиною та найближчими точками з кожного класу. Більша межа поліпшує узагальнення до даних, які алгоритм не бачив. Опорні вектори — критичні точки, котрі найближчі до межі. Вони визначають позицію гіперплощини та її орієнтацію, при цьому забезпечуючи ефективність методу, оскільки тільки такі точки відіграють важливу роль.

Розрізняють наступні ключові концепції. По-перше, класифікація може бути лінійною або нелінійною. Лінійний алгоритм добре працює тоді, коли дані можна

розділити прямою або площиною. На противагу цьому, нелінійний алгоритм користується ядром для проєктування даних у простір вищої розмірності, де можливе лінійне розмежування. Зазвичай користуються поліноміальним ядром та радіальними базисними функціями (RBF).



2.9. Класифікація даних методом опорних векторів [94]

Також розрізняють тверді та м'які межі. Тверду межу будують у припущенні ідеальної сепарабельності, з жодним допуском до неправильної класифікації. М'яка межа досить гнучка завдяки параметру регуляризації C та фіктивним змінним, котрі дозволяють деякі помилки у класифікації. Такий підхід забезпечує більшу стійкість моделі до шумів та викидів.

Метод опорних векторів (рис. 2.9.) є одним з найбільш популярних алгоритмів машинного навчання [92], [95]. Алгоритм навчання будує гіперплощину або пряму, яка розділяє навчальну вибірку на два класи. Зокрема, алгоритм шукає коефіцієнти,

котрі дозволяють поділити на класи краще. Точки, котрі знаходяться найближче до цієї прямої називають опорними векторами. Найкращою прямою лінією вважають ту, для якої відстань до опорних векторів найбільша.

Базовим параметром цього методу є параметр регуляризації, який виправляє кривину межі між прямою і точністю класифікації елементів навчальної вибірки. Чим більше значення параметру, тим більш звивистою є лінія моделі, і тим точніше вона класифікує об'єкти навчальної вибірки. Таким чином, необхідно правильно вибрати параметри моделі для певного набору даних для того, аби досягнути високої точності. Функцію втрат визначають як помилки тільки тих прогнозованих значень, які розташовано далеко від навчальних даних, тобто, на відстані, більшій за ϵ , і параметр ядра γ , котрий показує, як кожен елемент навчальної вибірки впливає на генерування лінії. Таким чином, чим менше значення γ , тим більше об'єктів залучено у вибір кривої. Якщо γ велике, то алгоритм розглядає тільки ті елементи, які знаходяться найближче до кривої.

У методі опорних векторів, точкам, котрі найближчі одна до одної, надають більшу вагу при виборі гіперплощини. Таким чином, вибираючи правильно параметри, можна досягнути високої точності.

Метод опорних векторів ґрунтується на ідеї площини прийняття рішення, котрі задають межі прийняття рішень. Площиною прийняття рішення називають гіперплощину, яка розділяє множину об'єктів, котрі належать різним класам.

Схематичний приклад наведено на рис. 2.10. [92].

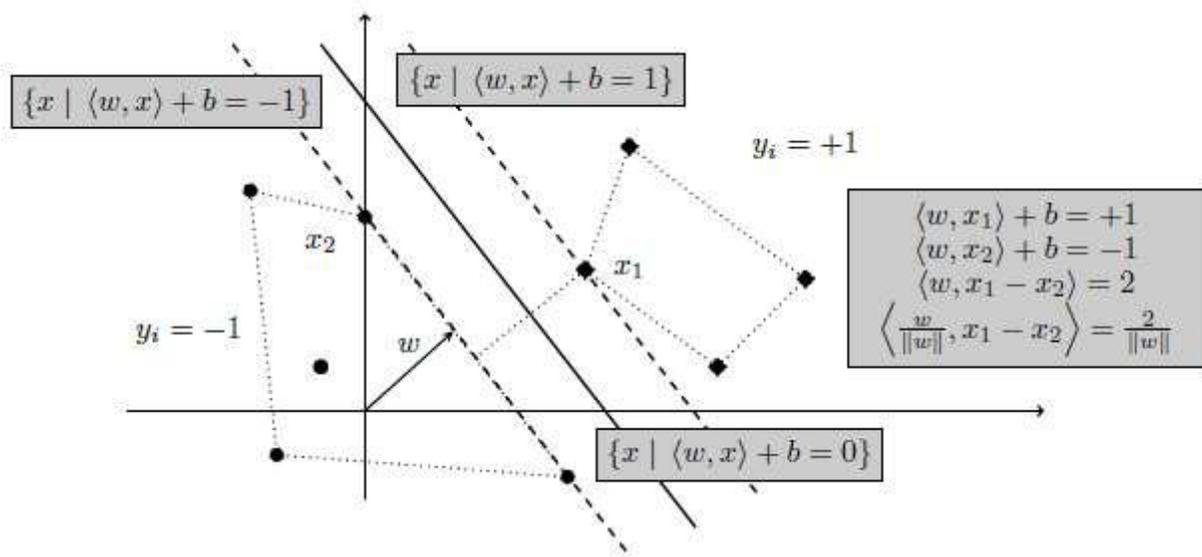


Рис. 2.10. Приклад класифікації об’єктів методом опорних векторів
 Гіперплощину у просторі H описують множиною $\{x \in \mathbb{N} | \langle w, x \rangle + b = 0\}$,
 де $w \in \mathbb{N}, b \in \mathbb{R}$. Така гіперплощина природно ділить H на два півпростори:
 $\{x \in \mathbb{N} | \langle w, x \rangle + b \geq 0\}$ і $\{x \in \mathbb{N} | \langle w, x \rangle + b \leq 0\}$.

Таким чином, нею можна скористатися як площиною прийняття рішень бінарного класифікатора. У випадку заданої множини $X = \{x_1, \dots, x_m\}$, межею є відстань від найближчої точки X до гіперплощини. Елементарні геометричні міркування показують (рис. 2.9.), що відстань від точки x_i до гіперплощини задають наступним чином: $|\langle w, x_i \rangle + b| / \|w\|$.

У такому випадку, межею є просто $\frac{\min_{i=1, \dots, m} |\langle w, x_i \rangle + b|}{\|w\|}$.

Параметризація гіперплощини (рис. 2.10.) не єдина. Приміром, якщо помножити w та b на одну й ту ж ненульову сталу, отримаємо ту саму гіперплощину. Одним із способів усунути цю неоднозначність, є встановити $\min_{i=1, \dots, m} |\langle w, x_i \rangle + b| = 1$.

У цьому випадку, межа просто стає $1/\|w\|$ [92].

На рис. 2.11. [92] проілюстровано основну ідею методу опорних векторів. Тут можна побачити оригінальні, початкові об’єкти, відображені множиною

математичних функції, котрі називають ядрами. Процес перевпорядкування об'єктів називають відображенням. Потрібно зазначити, що у таких нових координатах, відображені об'єкти є лінійно роздільними, і, таким чином, замість побудови складної кривої, єдиною річчю, яку потрібно здійснити, є знайти оптимальну криву, яка може розділити об'єкти.

На рис 2.11. чорним зображено класифіковані точки $(y_i \langle w, x_i \rangle + b) > 1$, синім позначено $(y_i \langle w, x_i \rangle + b) = 1$ опорні вектори, а червоним – помилки межі $(y_i \langle w, x_i \rangle + b) < 1$ [92].

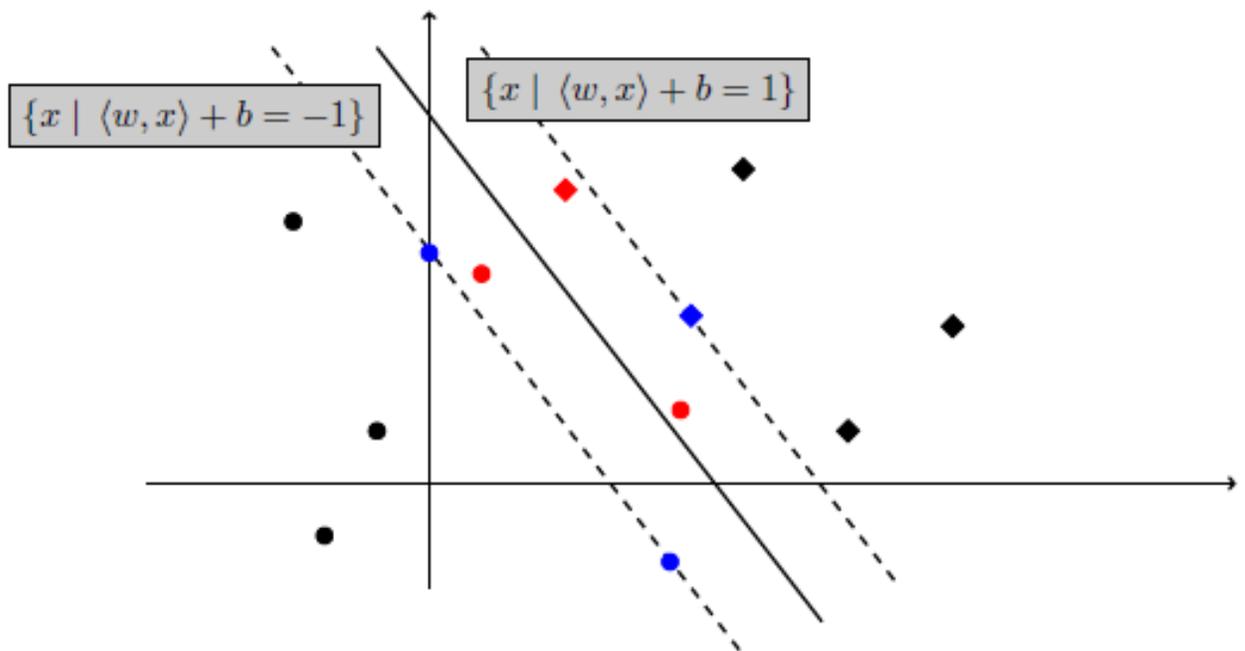


Рис. 2.11. Базова ідея методу опорних векторів [92]

Метод опорних векторів дозволяє розв'язувати як задачі регресії, так і задачі класифікації, і може опрацьовувати багато неперервних та категоріальних змінних.

Для категоріальної змінної, створюється фіктивна змінна із мітками або нуль, або одиниця. Таким чином, категоріальна залежна змінна, котра складається із трьох рівнів, приміром, (A, B, C) , представляється множиною трьох фіктивних змінних:

$$A: \{1\ 0\ 0\}, B: \{0\ 1\ 0\}, C: \{0\ 0\ 1\} \quad (2.12)$$

Для того, аби побудувати оптимальну гіперплощину, метод опорних векторів запускає ітеративний алгоритм навчання, котрий мінімізує функцію помилок. Залежно від форми функції помилок, моделі SVM можна розділити на чотири окремі групи [96]:

- класифікація методом опорних векторів типу 1, також відома як класифікація C-SVM;

- класифікація методом опорних векторів типу 2, також відома як класифікація nu-SVM;

- регресія методом опорних векторів типу 1, також відома як регресія epsilon-SVM;

- регресія методом опорних векторів типу 2, також відома як регресія nu-SVM.

Для цього типу методу опорних векторів, навчання ґрунтується на мінімізації функції помилок за наступних обмежень:

$$\frac{1}{2} w^T w + C \sum_{i=1}^N \zeta_i \quad (2.13)$$

$$y_i (w^T \phi(x_i) + b) \geq 1 - \zeta_i, \zeta_i \geq 0, i = 1, \dots, N,$$

де C - стала місткості, w - вектор коефіцієнтів, b - стала, $\zeta_i, (i = 1, \dots, N)$ параметри для опрацювання невідділювальних даних, тобто входів. Індекс i позначає N елементів тренувальної вибірки.

Потрібно зауважити, що $y \in \{\pm 1\}$ - мітки класу, а $x_i, (i=1, \dots, N)$ - незалежні змінні. Ядро ϕ застосовують для перетворення даних з незалежних входів до простору ознак. Чим більше значення C , тим більшим накладають штраф за помилку. Таким чином, C потрібно вибирати обережно, для того, щоб уникнути перенавчання.

На відміну від класифікації методом опорних векторів типу 1, модель класифікації методом опорних векторів типу 2 мінімізує функцію помилок:

$$\frac{1}{2} w^T w - \nu p + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \zeta_i \quad (2.14)$$

за наступних обмежень:

$$y_i (w^T \phi(x_i) + b) \geq \rho - \zeta_i \text{ і } \zeta_i \geq 0, i=1, \dots, N, \rho \geq 0. \quad (2.15)$$

При розв'язуванні задачі регресії методом опорних векторів оцінюють функціональну залежність залежної змінної y від множини незалежних змінних x . Вона передбачає, які й інші задачі регресії, що зв'язок між незалежними змінними та залежною здається детермінованою функцією f та деяким адитивним шумом:

$$y = f(x) + k, \quad (2.16)$$

де k - шум.

Тоді задача полягає у відшуканні функції f , яка може коректно передбачати нові випадки, які метод опорних векторів до того не бачив. Це можна досягнути, тренуючи модель опорних векторів на навчальній вибірці, процес, котрий полягає, як і у випадку класифікації, у послідовній оптимізації функції помилок. Залежно від вигляду функції помилок, виділяють дві моделі методу опорних векторів:

Для методу опорних векторів типу 1, функція помилок наступна:

$$\frac{1}{2} w^T w + C \sum_{i=1}^N \zeta_i + C \sum_{i=1}^N \zeta_i^* \quad (2.17)$$

яку мінімізують за наступних обмежень:

$$\begin{aligned} w^T \phi(x_i) + b - y_i &\leq \varepsilon + \zeta_i^* \\ y_i - w^T \phi(x_i) - b_i &\leq \varepsilon + \zeta_i \\ \zeta_i, \zeta_i^* &\geq 0, i = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (2.18)$$

Для моделі опорних векторів типу 2, функцію помилок задають наступним чином:

$$\frac{1}{2} w^T w - C \left(v\varepsilon + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\zeta_i + \zeta_i^*) \right) \quad (2.19)$$

яку мінімізують за обмежень:

$$\begin{aligned} (w^T \phi(x_i) + b) - y_i &\leq \varepsilon + \zeta_i \\ y_i - (w^T \phi(x_i) + b_i) &\leq \varepsilon + \zeta_i^* \\ \zeta_i, \zeta_i^* &\geq 0, i = 1, \dots, N, \varepsilon \geq 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

У методі опорних векторів функції таких ядер можуть бути лінійними, поліноміальними, радіальними базисними функціями та сигмоїдами. Радіальні базисні функції найчастіше вибирають типом ядра у опорно-векторних машинах. Це відбувається головню через те, що вони забезпечують локалізовані та скінченні відповіді для усіх дійсних значень.

2.6.3. Метод випадкових лісів

Випадкові ліси, також відомі як випадкові ліси дерев прийняття рішень, – ансамблеві методи навчання, котрі широко застосовують для класифікації, регресії, та інших задач. Концептуальна ідея вперше запропонована у 1995 році у праці [97], в якій застосовано метод випадкових підпросторів – стратегію для імплементації стохастичної дискримінації, фреймворка класифікації, запропонованого у статті [98].

Пізніше, у роботі [99] розширено алгоритм, по'єднавши техніку беггінгу з випадковим вибором ознак. Такий гібридний підхід, який також також незалежно досліджували у роботі [100], ґрунтується у побудові лісу з дерев прийняття рішень із зменшеною варіансою.

Випадковий ліс складається з довільної кількості (ансамблю) простих дерев. Алгоритм є доволі швидким і добре справляється із розрідженістю. Його швидкість збіжності залежить тільки від кількості сильних ознак і не від того, скільки зашумлених ознак знаходиться у наборі даних [101].

Ідею алгоритму випадкових лісів наведено на рис. 2.12.

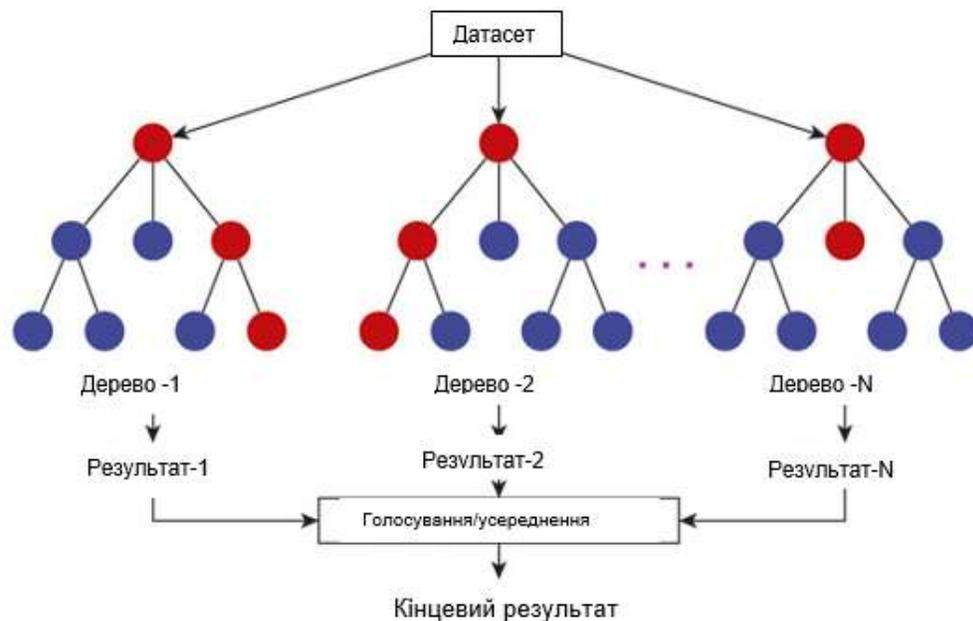


Рис. 2.12. Ідея методу випадкових лісів [102]

□ Алгоритм створює під час навчання велику кількість дерев прийняття рішень. Для задач класифікації, фінальним виходом слугує клас, який найбільш часто передбачили окремі дерева. Для регресії, це середнє з їх передбачень. Такий підхід дозволяє уникнути тенденції дерев прийняття рішень перенавчатися на тренувальному наборі даних.

Зокрема, алгоритм будує набір дерев прийняття рішень, а потім усереднює результати своїх передбачень. Важливою є випадковість при створенні кожного дерева. Якщо створено багато ідентичних дерев, результатом буде точність одного дерева [103].

Повторюючи таку процедуру багато разів, отримують набір дерев [103].

У цьому випадку, всі ці дерева є випадковими у деякому сенсі, оскільки для того, аби створити кожне з них, вибирали випадкову підмножину вибірки (рис. 2.13.) [104].

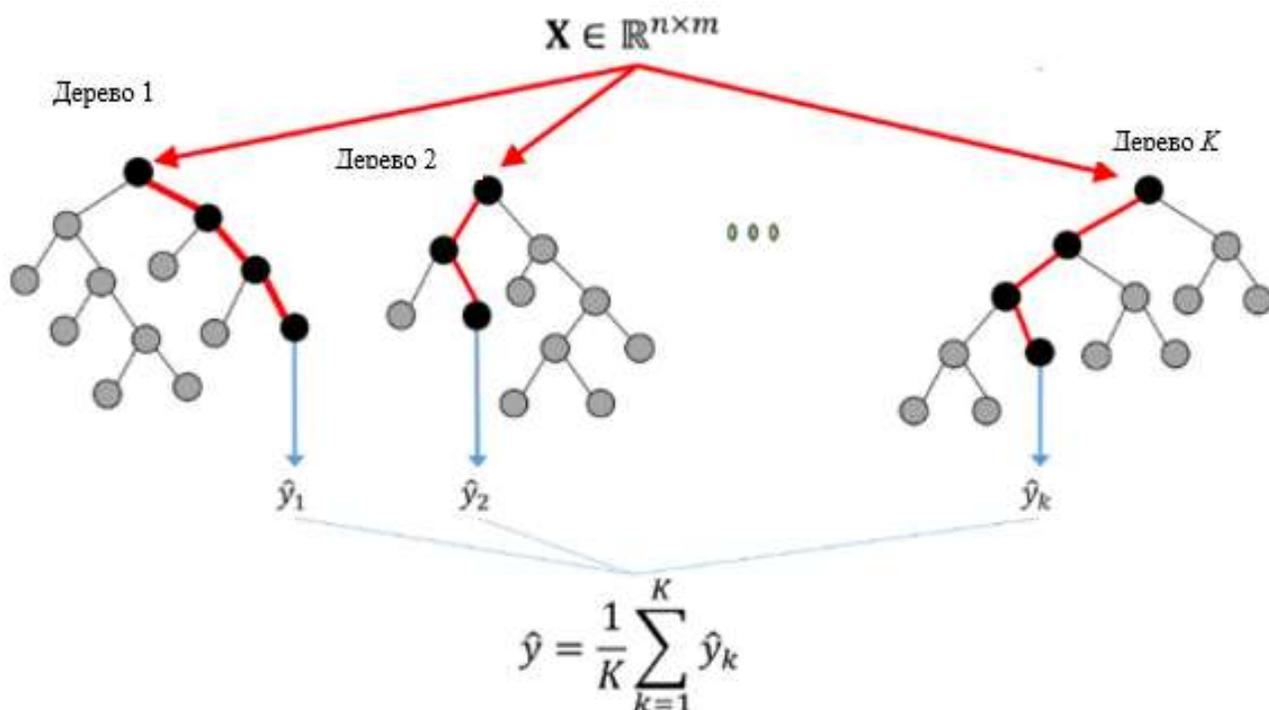


Рис. 2.13. Алгоритм випадкових лісів [104]

Алгоритм також має інший параметр: розмір випадкової підмножини, вибраної на кожному кроці побудови дерева.

Для того, аби здійснити прогнозування методом випадкових лісів, кожне дерево голосує за певний результат, і модель, за котру віддано найбільше голосів, виграє. Основні параметри алгоритму наступні:

- 1) найменша кількість даних у підмножині;
- 2) кількість дерев.

Ідея методу випадкових лісів полягає у побудові ансамблю, котрий сформовано певною кількістю дерев прийняття рішень, котрі вчилися незалежно одне від одного. Результат отримують після голосування усіх дерев у ансамблі. Серед головних переваг методу слід відзначити високу точність передбачень та можливість ефективного опрацювання даних. Метод випадкових лісів виявляється стабільним при незначних приростах інформаційних параметрів і менше залежить від перенавчання.

У випадку класифікації, розв'язок вибирають внаслідок голосування більшості, а у задачах регресії - усередненням.

2.6.4. Метод градієнтного спуску

Метод градієнтного спуску – один з найбільш розповсюджених алгоритмів оптимізації, який широко застосовують для розв'язання задач методами МН. Його стохастична версія останнім часом завоювала широку увагу і головно застосовується для тренування моделей глибоких нейронних мереж (ГНН). У методах ГНН, застосовують градієнт, обчислений після елемента вибірки або групи елементів вибірки, для того, аби уникнути споживання дорогавартісних обчислювальних ресурсів та сідлових точок. Стохастична оптимізація є фундаментальним методом, котрим користуються у моделях МН, в основному з огляду на алгоритм зворотного поширення помилки у НМ [47].

На рис. 2.14. наведено схематичну діаграму методу градієнтного спуску.

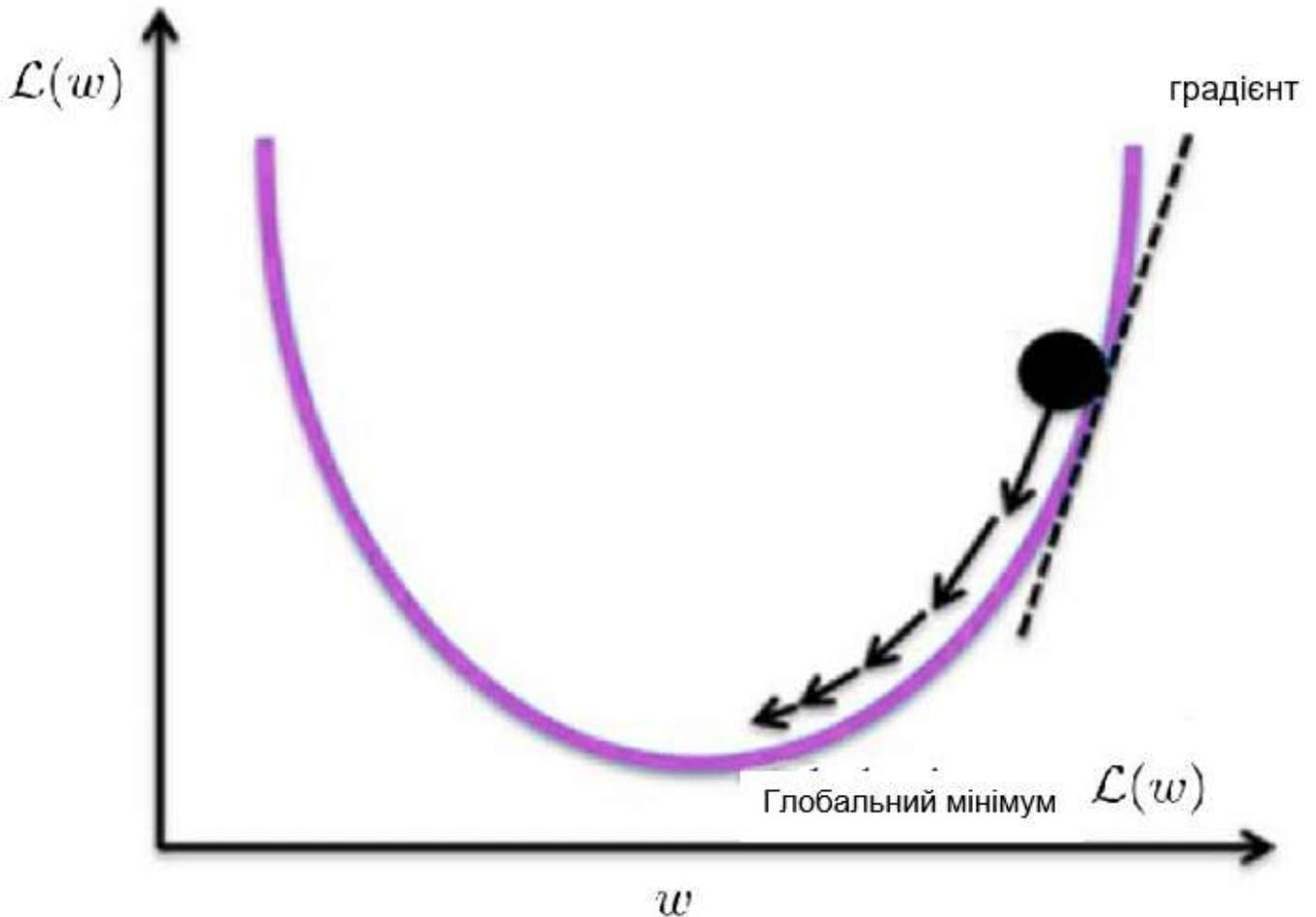


Рис. 2.14. Проста схематична діаграма методу градієнтного спуску [105]

Ідея методу полягає у знаходженні оптимуму (зазвичай мінімуму) функції, рухаючись у напрямку антиградієнта, тобто, градієнта, взятого з протилежними знаком.

2.6.5. Методи бустінгу

Бустінг – метод, котрий дозволяє побудувати високоточні передбачення із декількох не настільки точних передбачень. Запропоновані Friedman [106], [107] та Natekin and Knoll [108], градієнтні бустінгові машини - моделі побудови прогнозів, котрі ґрунтуються на зворотній апроксимації та непараметричній регресії. Замість

того, аби будувати цілу модель, алгоритм градієнтного бустінгу генерує початкову модель і пропонує нові моделі, мінімізуючи функцію втрат для того, аби отримати найбільш точну модель [108], [109].

Алгоритми бустінгу є доволі різноманітними, кожен із своїми особливими властивостями та сильними сторонами. Одним із перших та найбільш ефективних алгоритмів бустінгу є AdaBoost [110], що є аббревіатурою від Adaptive Boosting. Алгоритм AdaBoost ітеративно переобчислює ваги неправильно класифікованих елементів вибірки, пропонуючи наступні моделі, які звертають більшу увагу на ці приклади.

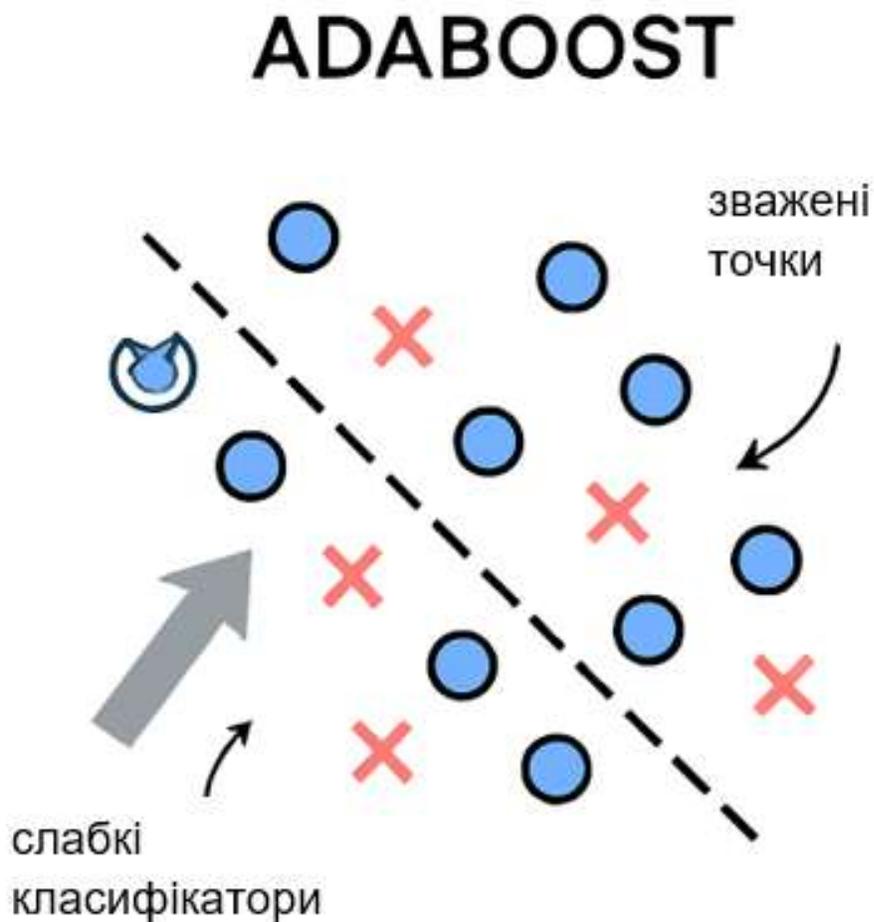


Рис. 2.15. Основна ідея методу AdaBoost

З рис. 2.15. видно, як декілька слабких класифікаторів (наприклад, прості дерева рішень) комбінуються в один сильний ансамбль. Дані зображено у вигляді синіх кружечків та червоних хрестиків. Слабкі класифікатори володіють простими межами прийняття рішень. Ваги для помилково класифікованих точок виділено жирними контурами. Кінцевий ансамбль формує більш точну межу класифікації.

Ключова ідея методу AdaBoost полягає у тому, що кожен наступний слабкий класифікатор фокусується на тих прикладах, які неправильно класифіковано раніше, а разом вони створюють сильну модель.

2.6.6. Метод нейронних мереж

Нейронна мережа (НМ) – відносно нова система та метод обчислень машинного навчання [111]. Метод НМ – модель опрацювання даних, котрий ґрунтується на способі, яким біологічна нервова система, така, як мозок, опрацьовує дані. Такий метод сфокусований на нейронній структурі кортексу ссавців, однак у значно меншому масштабі. Багато експертів з ШІ переконані, що НМ є найкращою і, напевно, єдиною надією на створення розумної машини.

НМ створено у той самий спосіб, як і людський мозок, з вузлами, котрі називають нейронами, сполученими у вигляді мережі. Нейрони — мільярди клітин, з яких складається мозок людини. Кожен нейрон має тіло клітини, яке опрацьовує інформацію, переносячи її від і до мозку, тобто, він має входи і виходи [112]. Основною ідеєю таких мереж є, до певної міри, той спосіб, у який працює біологічна нервова система, для того, аби опрацьовувати дані та інформацію для того, щоб навчатися та створювати знання. Ключовим елементом цієї ідеї є створення нових структур у системі опрацювання інформації. Архітектуру НМ зображено на рис. 2.16. [113].

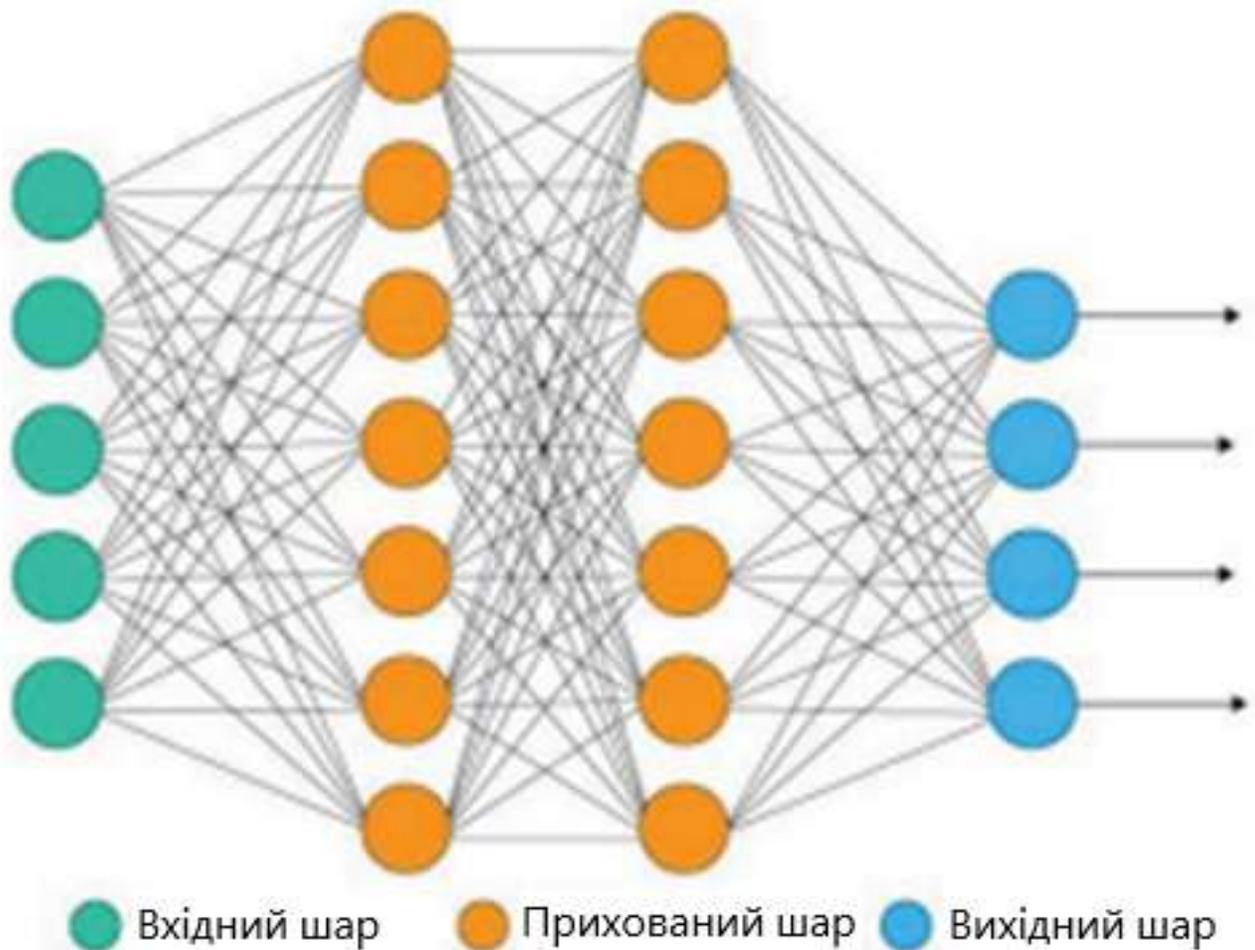


Рис. 2.16. Архітектура нейронної мережі [113]

Система складається з великої кількості з'єднаних між собою елементів опрацювання інформації, котрі називають нейронами, які працюють разом для того, аби розв'язати задачу і передати інформацію через синапси, котрі є електромагнітними з'єднаннями. Нейрони організовано у вигляді шарів. Вхідний шар отримує дані, тоді як вихідний шар генерує кінцевий результат. Між такими двома шарами, може знаходитися один або декілька прихованих шарів. Така архітектура ускладнює прогнозування або знання про точний потік даних. Кожне з'єднання має певну вагу, а кожен нейрон має своє порогове значення і функцію активації [114]. Нейрони, які мають порогове значення, передають сигнал, якщо агрегований сигнал перевищує його. Значення функції активації є зваженою сумою суматора. Вихідний

сигнал генерується, ґрунтуючись на сигналі від цього значення активації. Відношення між вагою кожного входу і виходу системи НМ зображено на рис. 2.17.

Вхідні нейрони активуються через сенсори, які отримують сигнал із середовища, а інші нейрони активуються через зважені зв'язки від попередньо активованих нейронів. Певні нейрони можуть впливати на середовище, слугуючи пусковим гачком для дій. Навчання НМ полягає у обчисленні ваг, які дозволяють НМ показувати бажану поведінку [115].



Рис. 2.17. Ваги кожного елемента і входи та виходи НМ [116]

У таких мережах, якщо одну клітину пошкоджено, інші клітини можуть замінити її відсутність і зробити свій вклад у її відновлення. Такі мережі можуть навчатися. Власне, здатність до навчання є найбільш важливою ознакою розумної системи. Система, котра навчається, є більш гнучкою і її легше запрограмувати, тому вона можна краще розв'язувати нові задачі [116]. НМ, як і люди, навчаються на основі різних прикладів, і НМ налаштовується для того, аби розв'язувати певні задачі, такі, як визначення певних закономірностей і категоризацію інформації під час процесу навчання. НМ дуже широко застосовують у системах контролю або моделюванні систем, котрі мають невідому або дуже складну внутрішню структуру. Приміром, НМ

можна застосовувати для контролювання входу двигуна, у цьому випадку НМ сама навчиться функції контролю. Навчання у таких системах адаптивно, тобто, вага синапсів змінюється у такий спосіб, що система продукує коректну відповідь у випадку нових входів [117].

Коли НМ навчається, їй надають множину входів та відповідних виходів у випадку навчання з учителем.

У випадку достатньо великих наборів даних, НМ дуже корисні. НМ можуть виконуватися досить швидко, аніж їхні лінійні конкуренти, при опрацюванні масивних, неперервних потоків даних, таких, як розпізнавання мови або дані з комп'ютерних сенсорів. Це означає, що НМ мають досить даних для того, аби згенерувати математичні моделі даних, котрі поступають на входи НМ.

Загалом, нейронна мережа є системою з'єднаних простих процесорів (неройнів), які взаємодіють один з одним. Вектор $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ прибуває на вхід штучного нейрона. Кожен сигнал множать на відповідні ваги w_1, w_2, \dots, w_n , і згодуюють на суматор, котрий позначають Σ . Кожна вага відповідає силі одного біологічного синаптичного з'єднання. Суматор, котрий належить тілу біологічного елемента, додає зважені входи і створює вихід, котрий називають NET. Кожен нейрон мережі має справу тільки з сигналами, які він періодично отримує, та сигналами, котрі він періодично надсилає іншим нейронам. Однак, сполучені у велику мережу із контрольованою взаємодією, такі локально прості нейрони разом можуть розв'язувати достатньо складні задачі. Після цього, функція активації F перетворює сигнал NET і дозволяє нейронам отримувати вихідний сигнал Out (рис .2.18.).

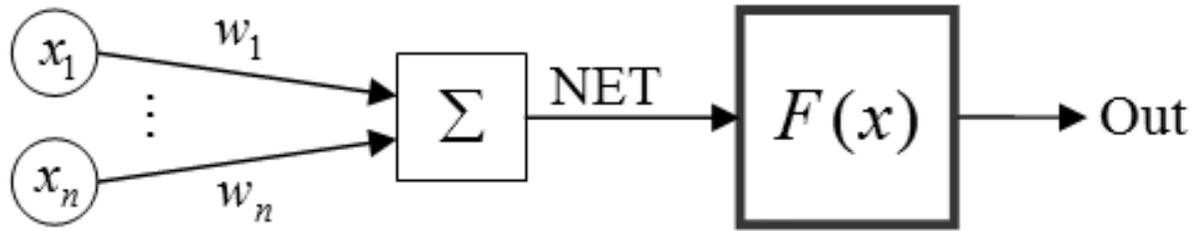


Рис. 2.18. Модель штучного нейрона [118]

Таким чином, дана модель складається з трьох основних елементів:

- 1) Синапсів, котрі характеризуються своїми вагами або силою.
- 2) Суматором, котрий додає входні сигнали, зважені відповідно до синапсів нейрона.
- 3) Функцією активації, яка обмежує амплітуду вихідного сигналу нейрона. Зазвичай, нормалізований діапазон виходу нейрона потрапляє у сегмент $[0,1]$ або $[-1,1]$.

Алгоритм функціонування нейрона ґрунтується на наступних формулах:

$$\begin{aligned}
 NET_{jl} &= \sum_i w_{ijl} \times x_{ijl}, \\
 Out_{jl} &= F(NE_{Tjl} - \theta_{jl}), \\
 x_{ij(l+1)} &= Out_{il},
 \end{aligned}
 \tag{2.21}$$

де i – кількість входів у відповідному шарі; j – кількість нейронів у шарі; l – кількість шарів; x_{ijl} - i -тий входний сигнал до j -того нейрона у шарі l ; w_{ijl} - синаптична вага i -того входу j -того нейрона у шарі l ; NET_{jl} - сигнал NET j -того нейрона шару l ; Out_{jl} - вихідний сигнал; F - нелінійна функція активації; θ_{jl} – пороговий рівень цього нейрона.

Основні та найбільш часто вживані функції активації нейрона наступні:

- порогова функція, яку можна описати наступними формулами:

$$Out = \begin{cases} 0, NET < \theta, \\ 1, NET \geq \theta \end{cases} \quad (2.22)$$

- сигмоїдна функція, яку часто застосовують у багат шарових перцептронах та інших мережах з неперервними сигналами. Прикладом сигмоїдної функції є логарифмічна функція.

$$Out = \frac{1}{1 + e^{-NET}} \quad (2.23)$$

- гіперболічний тангенс, яким також користуються у мережах із неперервним сигналом. Його особливість полягає у можливості повертати від'ємні значення:

$$Out = \frac{e^{NET} - e^{-NET}}{e^{NET} + e^{-NET}} \quad (2.24)$$

Основні типи функцій активації наведено на рис. 2.19.

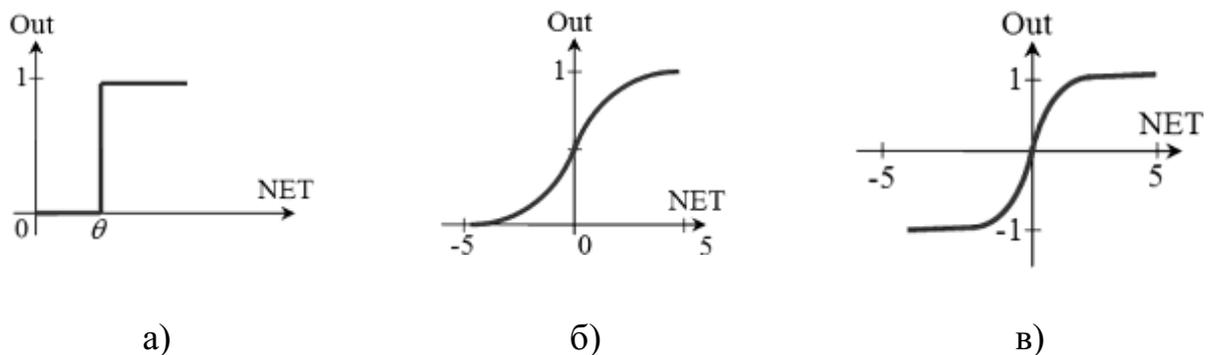


Рис 2.19. Функція активації нейрона (а) порогова, (б) сигмоїдна, (с) гіперболічний тангенс

Результат роботи нейромережі залежить від значення вагових коефіцієнтів і функції активації нейронів.

Нейронні мережі володіють наступними можливостями:

- Нелінійність: нейронна мережа складається із нелінійних з'єднань нейронів. Ця властивість дуже важлива, особливо тоді, коли основний фізичний механізм, котрий відповідає за генерування вхідного сигналу також нелінійний (приміром, сигнал мови);

- Адаптивне навчання: здатність поліпшувати характеристики, котрі дозволяють опрацьовувати навчальні послідовності, котрі подають на вхід нейронної мережі і застосовувати отриманий досвід у майбутньому.

- Відображення входів та виходів: поширена парадигма, така як навчання з учителем, котра полягає у виборі синаптичних ваг нейронної мережі, ґрунтуючись на множині тренувальних елементів або екземплярів. Кожен приклад складається з єдиного вхідного сигналу та відповідного виходу. Синаптичні ваги мережі налаштовують таким чином, аби мінімізувати різницю між вихідною відповіддю та актуальною. Навчання продовжується доти, поки мережа не досягне стабільного стану, де нема значних змін.

- Самоорганізація: нейронна мережа характеризується зміною в своїй архітектурі або формою представлення інформації.

- Узагальнювальна здатність: після завершення навчання, нейромережа стає нечутливою до деяких змін вхідного сигналу, що дозволяє застосовувати її до даних, які є неповні або зашумлені.

- Обчислення у реальному часі: нейромережеві обчислення можуть виконуватися паралельно, при цьому їх швидкодія збільшується.

- Контекст: кожен нейрон у мережі потенційного залежить від глобальної активності інших нейронів.

2.6.7. Архітектура нейронних мереж та методи їх навчання

Нейронні мережі є набором нейронів, котрі сполучені між собою. Для того, аби створити нейронну мережу, здатну розв'язувати певну задачу, необхідно вибрати спосіб, у який з'єднувати нейрони і параметри ваг цих з'єднань. Структура нейронних мереж дуже пов'язана з вибором алгоритмів навчання. Загалом, виділяють три класи нейронних мереж:

- Одношарові нейронні мережі прямої подачі (рис. 2.20.). У багатошарових мережах, нейрони організовано у шари. Від вхідного шару нейронів, інформацію передають тільки до вихідного шару. Такий тип нейронної мережі називають одношаровою мережею, однак один шар означає шар обчислювальних нейронів. При обчисленнях кількості шарів, вхідні вузли не враховують, оскільки вони не здійснюють жодних обчислень.

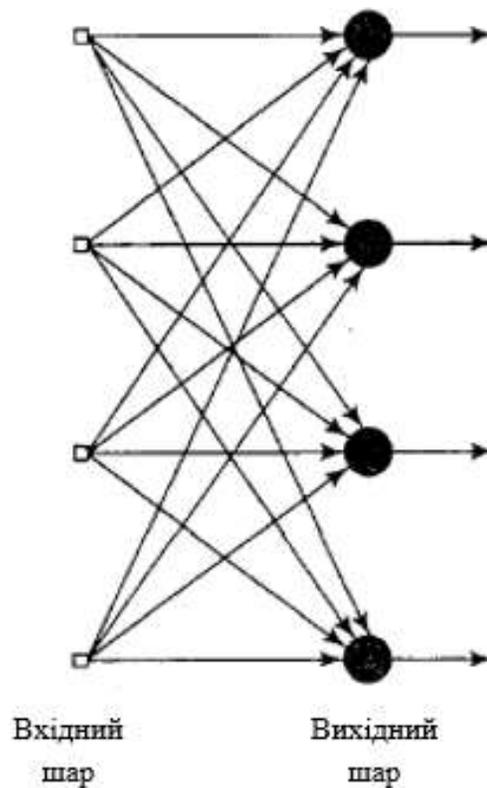


Рис. 2.20. Мережа прямої подачі з одним шаром нейронів [118]

- Багатошарові мережі прямої подачі (рис. 2.21.). Інший клас нейронних мереж характеризується присутністю одного або більше прихованих шарів. Такі мережі зазвичай називають багатошаровими персептронами. Вхідний сигнал передається до нейронів другого шару, тоді як вихідні сигнали другого шару нейронної мережі є входами для третього шару. Нейрони кожного шару нейронної мережі користуються вхідними сигналами тільки попереднього шару. Мережу переважно називають 12-2-1, де є 12 вхідних нейронів, 2 прихованих і 1 вихідний нейрон. Вона є повністю зв'язна, оскільки вузли кожного шару зв'язані із вузлами інших шарів. У випадку відсутності деяких синаптичних з'єднань, мережу називають частково зв'язною. Помилки у нейронах вихідного шару трапляються через невідомі помилки у нейронах прихованого шару.

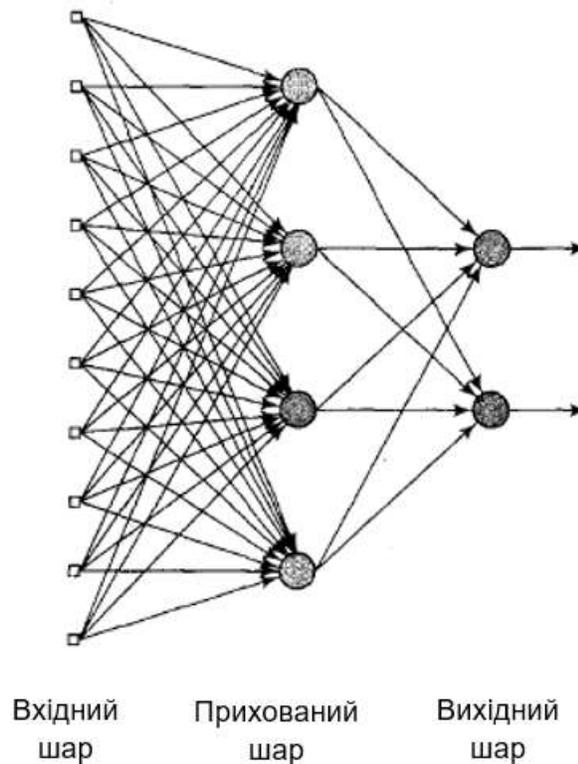


Рис. 2.21. Повністю з'єднана мережа прямої подачі з одним прихованим шаром і одним вихідним шаром [118]

- Рекурентні мережі (рис. 2.22.). Рекурентні нейронні мережі мають принаймні один зворотний зв'язок. Деякі нейронні мережі мають також приховані нейрони. Тоді зворотний зв'язок виходить від прихованих та вихідних нейронів. Наявність таких зв'язків у мережах впливає на їхню здатність навчатися та на продуктивність.

Важливою характеристикою нейронних мереж є здатність навчатися стосовно даних середовища і, таким чином, збільшувати свою продуктивність. Навчання нейронної мережі здійснюється в процесі налаштування процесу синаптичних ваг і рівнів зсуву. Загалом, нейронні мережі здобувають знання про середовище на кожному кроці процесу навчання. Виділяють два види навчання, такі як детерміноване та стохастичне.

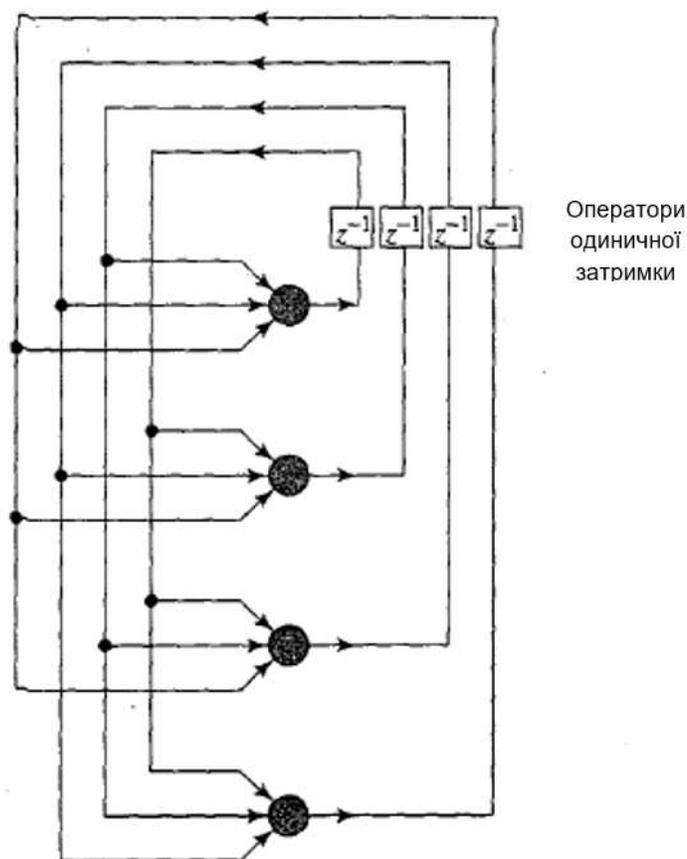


Рис. 2.22. Рекурентна нейронна мережа без самозворотних зв'язків та без прихованих нейронів [118]

Фундаментом детермінованих методів навчання є налаштування параметрів нейронної мережі впродовж ітерації. Зворотне поширення помилки є детермінованим і поширеним методом навчання нейронної мережі.

Стохастичні методи включають ті, котрі змінюють параметри нейронної мережі випадковим чином і зберігають тільки такі зміни параметрів, котрі поліпшують результат. Алгоритми стохастичного навчання реалізують, порівнюючи помилки.

Навчання є процесом, коли вільні параметри нейромережі адаптуються під дією моделювання середовища. Вид навчання визначається наступними змінами параметрів: імпульси з середовища поступають на вхід нейронної мережі, внаслідок цього, параметри нейронної мережі змінюються.

Наведені вище правила для розв'язування задач нейронної мережі називають алгоритмом навчання. Не існує універсального алгоритму навчання, котрий підходить усім без винятку архітектурам нейронних мереж. Алгоритми навчання відрізняються тим, як вони налаштовують ваги нейронів. Важливою характеристикою є вивчений нейронною мережею метод з'єднання із середовищем. Існує три типи навчання нейронних мереж: навчання з учителем, навчання без учителя та змішане.

Навчання з учителем полягає у наявності знання, представленого у формі пар вхід-вихід. Вчитель формулює і передає бажану відповідь у мережу, котра навчається. Ця відповідь є результатом оптимальних дій, котрі мають бути виконані мережею. Параметри мережі налаштовуються з огляду на навчання вектора і помилки сигналу, тобто, різниці між бажаними та вихідними сигналами мережі.

Мережа з навчанням без учителя не може знати правильних відповідей на кожен екземпляр навчальної вибірки. Прикладом такого навчання є правило Хебба.

У змішаному випадку, частину ваг визначають навчанням з учителем, тоді як інші частини отримують тоді, коли мережа навчається самостійно.

Класичним прикладом навчання з учителем є метод зворотного поширення помилки (рис. 2.23). Два види сигналів ідентифіковано у цій частині мережі [118]:

1) Функція сигналів. Функцією сигналів називають вхідний сигнал, котрий потрапляє на вхідну частину мережі, поширюється вперед нейрон за нейроном через мережу і з'являється на вихідному кінці мережі як вихідний сигнал, тобто “функція сигналів”. Припускають, що він виконує корисну функцію на виході мережі, і у кожному нейроні мережі, через яку він проходить, сигнал обчислюють як функцію від входів та пов'язаних ваг, котрі застосовано до цього нейрона. Функцію сигналів також називають вхідним сигналом.

2) Сигнали помилок. Сигнал помилок виникає на вихідному нейроні мережі і поширюється назад шар за шаром через мережу, тобто “сигнал помилок” внаслідок його обчислення кожним нейроном мережі залучає функцію, яка залежить від помилок у тій чи іншій формі.

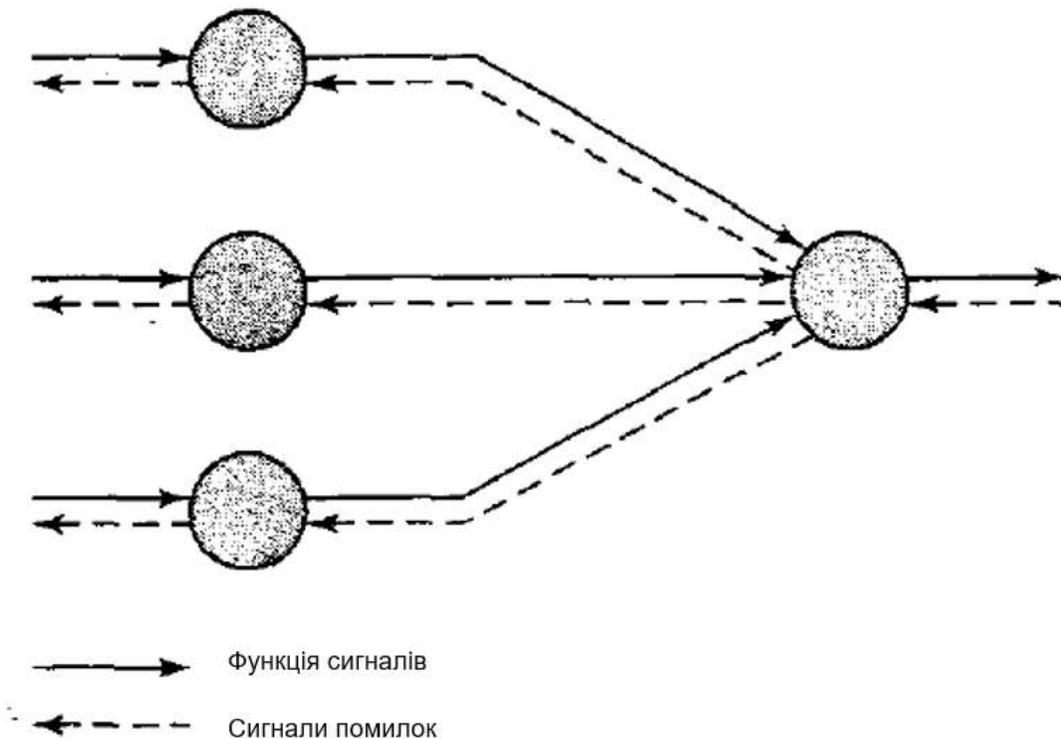


Рис. 2.23. Приклад напрямків двох основних потоків сигналів у багатощаровому персептроні прямого поширення функції сигналів та зворотного поширення сигналів помилок [118]

Таким чином, алгоритм зворотного поширення помилки забезпечує прямі та зворотні проходження через усі шари мережі. Під час прямого поширення, вхідний сигнал згодують на вхідний шар мережі, після чого сигнал передається через усі нейрони прихованого шару мережі. У цьому випадку, кожен нейрон прихованого шару обчислює суму вхідних сигналів, зважених синапсами, і користуючись функцією активації, передає відповідні значення суми до вихідного шару.

У вихідному шарі, кожен нейрон обчислює вхідні сигнали з нейронів вихідного шару, зважених синапсами, і, за допомогою функції активації, передає значення суми до виходу нейронної мережі.

У результаті цього процесу, генерується набір вихідних сигналів, який є актуальною відповіддю мережі на цей вхідний сигнал. Із прямим поширенням, усі синаптичні ваги мережі фіксуються і кожен нейрон мережі має нелінійну функцію активації.

Таким чином, вихідні нейрони, тобто, обчислювальні вузли, будують мережу вихідного шару. Інші нейрони, які теж є обчислювальними вузлами, представляють приховані шари нейронної мережі. Отже, приховані шари не є частиною виходів або входів нейронної мережі. Зокрема, на перший прихований шар поступають сигнали від вхідного шару. Після цього, результати, отримані на першому прихованому шарі, у свою чергу, потрапляють на наступний прихований шар, і так далі для іншої частини нейронної мережі.

Приховані або вихідні нейрони багат шарового перцептрона спроектовано так, аби виконувати обчислення функції сигналу, а також оцінювати вектор градієнтів.

Нейронні мережі широко застосовують у багатьох галузях науки і технології, особливо при побудові нейронних комп'ютерів.

Застосування нейронних мереж:

- Апроксимація функцій. Нейронна мережа із одним прихованим шаром і одним вихідним шаром може апроксимувати неперервну функцію.

- Асоціативна пам'ять. Відомо архітектури нейронних мереж, котрі запам'ятовують вхідні рисунки і асоціюють їх. Пізніше, коли такий рисунок подають на вхід нейронної мережі, вона відтворює його з пам'яті. З такою властивістю, здійснюють пошук інформації за вмістом.

- Контроль складних процесів. Справжні процеси характеризуються нелінійними залежностями. Вони містять шум, який спричинено зміною умов, і котрий визначає деякі зміни у характеристиках об'єктів. Розв'язання задач управління характеризується певними вимогами до алгоритмів керування і до технічних засобів, котрі їх реалізують. Найбільш ефективним є алгоритми, на котрих ґрунтується теорія адаптації. Такі методи потребують розвитку моделей досліджуваних об'єктів.

- Стиск інформації. Існують нейронні мережі із властивостями стиску інформації, тобто, у цьому випадку передається зменшений набір інформації.

- Розпізнавання і класифікація. Це галузь знань, у якій нейронні мережі переважно проявляють себе з найкращої сторони.

- Оптимізація: багато важливих задач формулюють у термінах оптимізації, де необхідно відшукати екстремуми, тобто, мінімуми або максимуми.

- Прогнозування: ґрунтується на ідеї причинно-наслідкових зв'язків. Формування процесів відбувається під впливом чинників, дія яких проявляється у різноманітних напрямках.

2.7. Висновки до розділу 2

У розділі описано методичку прогнозування функціональних властивостей та довговічності сплавів методами машинного навчання, що потрібно для побудови відповідних регресійних залежностей на основі відповідних алгоритмів. Основними аспектами дослідження були система аналізу даних Orange, попередня обробка даних та аугментація відповідного набору даних.

В якості основного інструменту для аналізу даних користувалися програмним середовищем Orange, котре дозволило здійснити повний цикл інтелектуального аналізу даних та побудувати відповідні регресійні залежності методами машинного навчання з учителем.

Наведено методику попередньої обробки даних на основі перетворення ознаки у діапазон $[0, 1]$, що дозволило побудувати ефективні моделі машинного навчання, зокрема, нейронні мережі.

Також представлено методики аугментації набору даних на основі кубічних сплайнів, методу інтерполяції Akima та модифікованого методу takima.

Подано загальну методику прогнозування функціональних властивостей та довговічності у вигляді блок-схеми, яка відображає основні кроки побудови відповідних регресійних залежностей.

Описано метод k найближчих сусідів, метод опорних векторів, метод випадкових лісів, метод градієнтного спуску, методи бустінгу та метод нейронних мереж.

Описані методики забезпечують високу точність прогнозування, що є фундаментом для науково обґрунтованих висновків та рекомендацій.

РОЗДІЛ 3

МОДЕЛЮВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПФ ТА ДОВГОВІЧНОСТІ ТИТАНОВОГО СПЛАВУ

3.1. Моделювання розмаху розсіяної енергії, напружень та деформацій СПФ

Залежності розмаху розсіяної енергії, напружень та деформацій від кількості циклів навантаження, котрі отримано у статті [119], спрогнозовано методами МН у програмному середовищі аналізу даних Orange 3.34.0. Цей програмний комплекс дозволяє візуально будувати блок-схеми алгоритмів та отримувати результати у формі моделей, числових даних та графіків. Загалом, побудовано три моделі [120]. Залежності відповідної фізичної величини від кількості циклів навантаження подавали на вхід кожної з моделей. Кількість циклів навантаження розглядали як незалежну змінну, а фізичну величину трактували як залежну змінну. Для того, аби збільшити точність результатів прогнозування, набір даних додатково збільшили, інтерполювавши експериментальні залежності методом кубічних сплайнів. Всього таким методом отримано 599 точок. Набір даних поділено на дві нерівні частини. Тренувальна вибірка містила 66 % загального набору даних. Шукані регресійні залежності побудовано методами МН з учителем, а саме: випадковими лісами, нейронними мережами, градієнтним бустінгом, AdaBoost, і методом k найближчих сусідів. Кожну модель додатково перевірили методом крос-валідації 5 разів. Блок-схему моделі, побудовану у програмному середовищі Orange, подано на рис. 3.1.

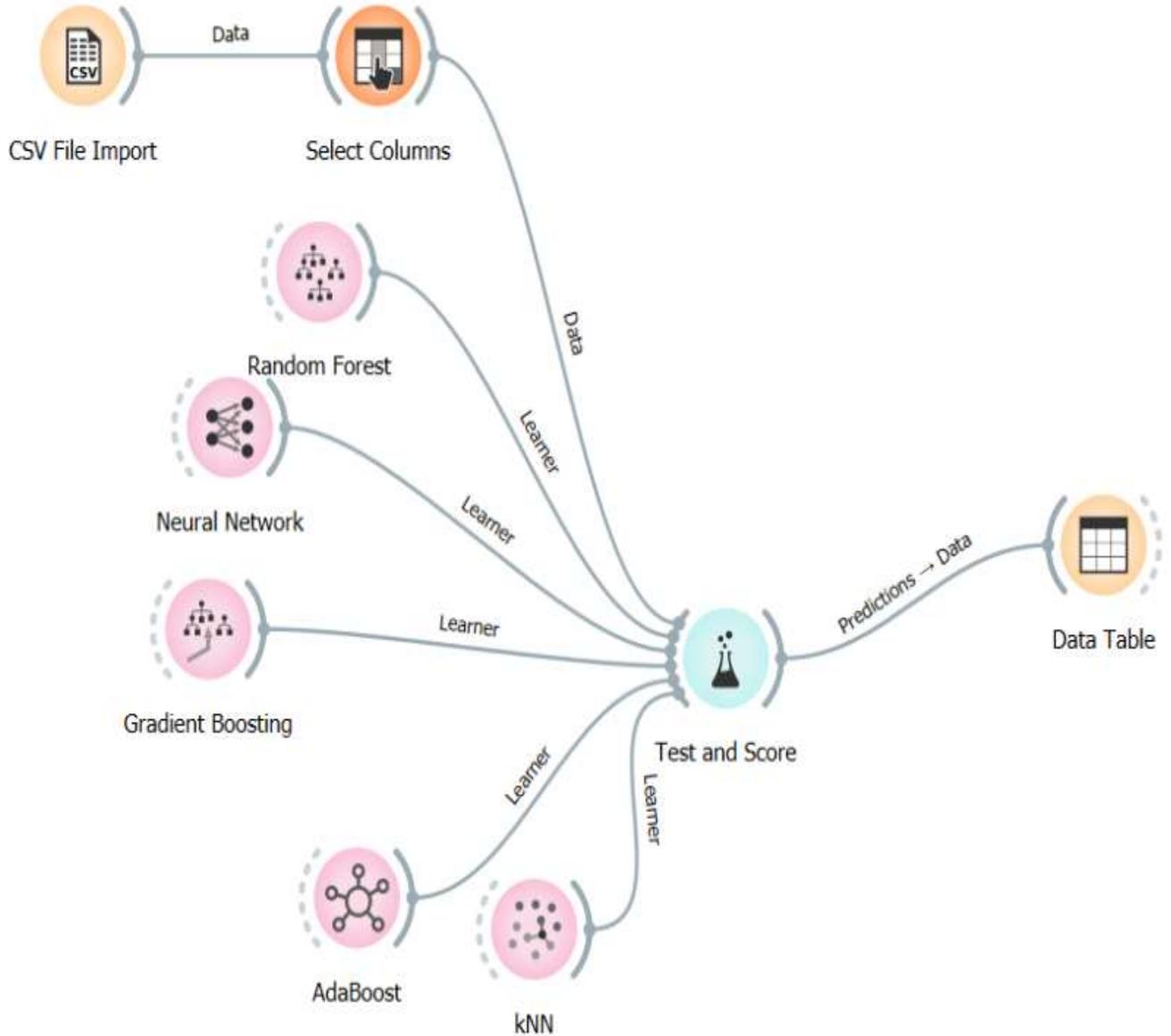


Рис. 3.1. Блок-схема моделі, отримана у програмному комплексі Orange

У таблицях 3.1-3.3 наведено помилки результатів та коефіцієнт детермінації, отримані моделюванням обраними методами МН з учителем для розмаху розсіяної енергії, напружень та деформацій, відповідно, залежно від кількості циклів навантаження.

Таблиця 3.1.

Помилки результатів та коефіцієнт детермінації, отримані моделюванням методами МН з учителем для розмаху розсіяної енергії

Модель	MSE	RMSE	MAE	R ²
kNN	0,086	0,294	0,114	1,000
AdaBoost	0,135	0,368	0,179	0,999
RandomForest	0,146	0,381	0,177	0,999
Gradient Boosting	0,150	0,388	0,207	0,999
Neural Network	1,133	1,064	0,493	0,994

Для розмаху розсіяної енергії найменша середньоквадратична помилка MSE та, відповідно, корінь середньоквадратичної помилки RMSE отримано методом k найближчих сусідів (kNN). Методи AdaBoost, RandomForest та GradientBoosting показали більш-менш однакові результати, із MSE 0,135, 0,146 та 0,150, відповідно. Метод НМ з MSE що дорівнює 1,133, зайняв останнє місце.

Таблиця 3.2.

Помилки результатів та коефіцієнт детермінації, отримані моделюванням методами МН з учителем для розмаху деформацій

Модель	MSE	RMSE	MAE	R ²
kNN	0,0005	0,022	0,003	0,908
AdaBoost	0,0005	0,022	0,004	0,907
RandomForest	0,0005	0,022	0,003	0,906

Модель	MSE	RMSE	MAE	R ²
Gradient Boosting	0,001	0,024	0,003	0,885
Neural Network	0,003	0,058	0,035	0,333

Для розмаху деформацій, найменша MSE, і відповідно, RMSE, отримані методом k найближчих сусідів, AdaBoost та методом випадкових лісів (Random Forest). Метод градієнтного бустінгу зайняв передостаннє, четверте місце. Останнє місце зайняв метод НМ з MSE, що складає 0,003. Стосовно MAE, встановлено, що вона приблизно однакова у моделях, побудованих методом k найближчих сусідів, методом AdaBoost, методом випадкових лісів та градієнтним бустінгом.

Таблиця 3.3.

Помилки результатів та коефіцієнт детермінації, отримані моделюванням методами МН з учителем для розмаху напружень

Модель	MSE	RMSE	MAE	R ²
kNN	0,006	0,294	0,114	1,000
AdaBoost	0,135	0,368	0,179	0,999
RandomForest	0,152	0,345	0,168	0,999
Gradient Boosting	0,150	0,388	0,207	0,999
Neural Network	1,133	1,064	0,493	0,994

Для розмаху напружень найменшу MSE і, відповідно, RMSE отримано методом k найближчих сусідів. Метод AdaBoost зайняв друге місце з MSE, що становив 0,135. Метод випадкових лісів та градієнтний бустінг показали приблизно однакові

результати. Метод НП з MSE, що дорівнювала 1,133, опинився на останньому, п'ятому місці.

3.2. Моделювання розмаху залишкових деформацій та розмаху розсіяної енергії СПФ

Моделювання здійснено у програмному комплексі аналізу даних Orange, який дозволяє користувачам візуально будувати блок-схеми алгоритмів опрацювання даних і отримувати результати числово та у вигляді графіків.

Кожен набір даних розділено на дві нерівні частини - навчальну вибірку та тестову вибірку. Навчальна вибірка містила 66% від загального набору даних. Інші 34%, що залишилися, вибрано як тестову вибірку.

Моделювання здійснено для чотирьох зразків. Для кожного зразка одержано наступні функціональні властивостей, такі як, розмах залишкової деформацію $\Delta\epsilon_{res}$ та розмах розсіяної енергії ΔW_{dis} [121].

Також, набір даних було додатково збільшено, застосовуючи метод інтерполяції Акіма [85].

Перед моделюванням, дані було попередньо опрацьовано відповідно до методик, описаних в розділі 2.

Цей метод враховує швидкий ріст функції та показує досить добрі результати. Інтерполяцію здійснено, застосувавши скриптову мову програмування високого рівня Python 3. Створено відповідний програмний код, у якому реалізовано вищезгаданий метод інтерполяції. У результаті такої здійсненої аугментації даних, отримано 1000 точок для кожної з наведених вище функціональних властивостей, як от, розмах залишкової деформацію $\Delta\epsilon_{res}$ та розмах розсіяної енергії ΔW_{dis} [122].

На рис. 3.2. наведено інтерполяцію даних залишкової деформації зразка #10 методом Акіма.

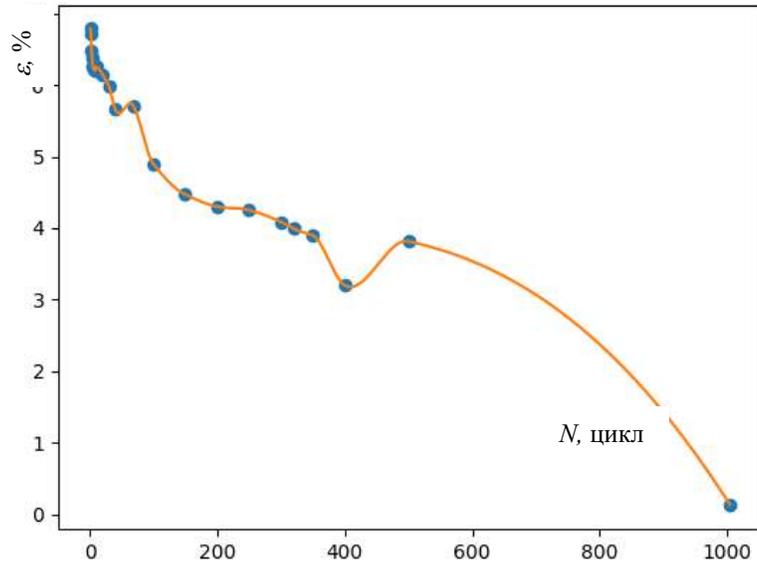


Рис. 3.2. Інтерполяція даних залишкової деформації зразка #10 методом Акіма

На рис. 3.3. наведено інтерполяцію даних розмаху дисипованої енергії зразка #10 методом Акіма.

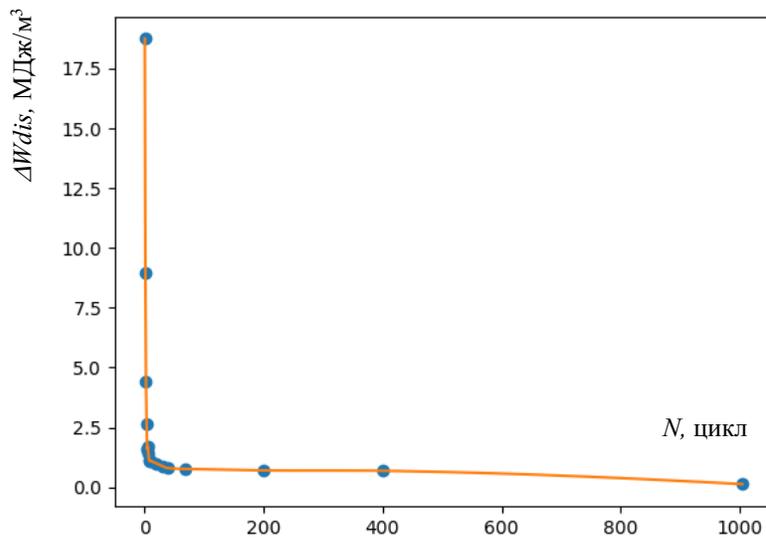


Рис. 3.3. Інтерполяція даних розмаху дисипованої енергії зразка #10 методом Акіма.

Така кількість даних є цілком достатньою для побудови відповідних моделей машинного навчання з учителем та дозволяє отримати високоточні прогнози.

На рис. 3.4. подано схему отриману в програмному середовищі Orange для моделювання функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми.

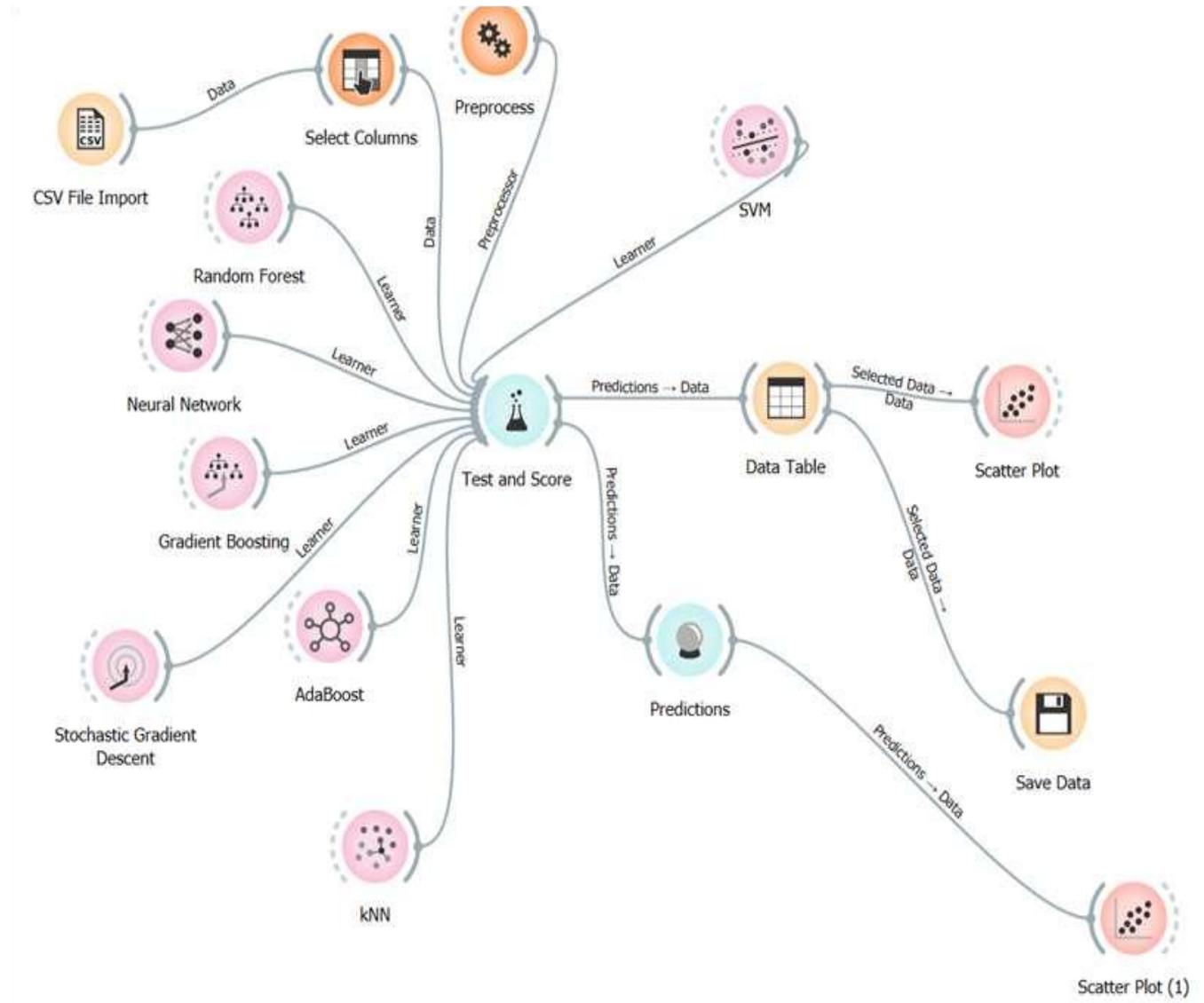


Рис. 3.4. Блок-схема обчислень у програмному середовищі аналізу даних Orange

Моделювання здійснено методом k найближчих сусідів, методом опорних векторів, методом стохастичного градієнтного спуску, методом випадкових лісів, нейромережами, градієнтним бустінгом та AdaBoost. У результаті моделювання, отримано регресійні залежності наявних наборів даних. Також, проведено перехресну валідацію результатів 10 разів.

Дані для $\Delta\epsilon_{res}$ and ΔW_{dis} для чотирьох досліджуваних зразків, котрі позначено #10, 13, 16 та 17, відповідно, описано відповідними методами машинного навчання з учителем. Для кожної моделі обчислено відповідні помилки MSE, RMSE, MAE та R^2 . Метрики моделей машинного навчання з учителем для зразка #10 подано у таблиці 3.4.

Таблиця 3.4.

Метрики моделей машинного навчання для зразка # 10

Зразок #10	$\Delta\epsilon_{res}$				ΔW_{dis}			
	MSE	RMSE	MAE	R^2	MSE	RMSE	MAE	R^2
SVM	0,089	0,298	0,244	0,95	0,395	0,628	0,092	0,137
SGD	0,199	0,446	0,401	0,888	0,409	0,639	0,156	0,107
Random Forest	2,56e-4	0,016	0,008	1	0,331	0,575	0,034	0,277
Neural Network	0,024	0,155	0,111	0,986	0,402	0,634	0,099	0,121
Gradient Boosting	3,24e-4	0,018	0,013	1	0,212	0,460	0,028	0,537
AdaBoost	1,96e-4	0,014	0,008	1	0,212	0,460	0,027	0,537
kNN	3,24e-4	0,018	0,006	1	0,276	0,525	0,032	0,397

Для зразка # 10, найменшу MSE досягнуто методом випадкових лісів, градієнтним бустінгом, AdaBoost і k найближчими сусідами для $\Delta\epsilon_{res}$. Це саме справджується для RMSE та MAE. Ці методи також дозволили досягнути найвищих

значень $R^2 = 1$. Така сама картина спостерігається для ΔW_{dis} . Метрики моделей для зразка # 13 наведено у таблиці 3.5.

Таблиця 3.5.

Метрики моделей машинного навчання для зразка # 13.

Зразок #13	$\Delta \epsilon_{res}$				ΔW_{dis}			
	MSE	RMSE	MAE	R ²	MSE	RMSE	MAE	R ²
SVM	0,055	0,234	0,089	0,515	0,352	0,539	0,122	0,187
SGD	0,089	0,299	0,164	0,211	0,408	0,639	0,216	0,058
Random Forest	0,015	0,121	0,014	0,87	0,102	0,319	0,026	0,765
Neural Network	0,086	0,293	0,13	1	0,398	0,631	0,149	0,08
Gradient Boosting	0,015	0,121	0,016	0,871	0,081	0,285	0,025	0,812
AdaBoost	0,015	0,121	0,017	0,871	0,081	0,285	0,024	0,812
kNN	0,02	0,142	0,015	0,823	0,138	0,371	0,025	0,681

Для зразка # 13, спостерігається та сама картина, як для зразка # 10. Найменші значення MSE, RMSE та MAE одержано методом випадкових лісів, градієнтними бустінгом, AdaBoost та методом k найближчих сусідів для $\Delta \epsilon_{res}$. Найбільші значення $R^2 = 1$ також досягнуто цими методами. Це саме справджується для ΔW_{dis} . Метрики моделі для зразка #16 наведено у таблиці 3.6.

Таблиця 3.6.

Метрики моделей машинного навчання для зразка # 16

Зразок #16	$\Delta\epsilon_{res}$				ΔW_{dis}			
	MSE	RMSE	MAE	R ²	MSE	RMSE	MAE	R ²
SVM	0,006	0,080	0,073	0,796	0,027	0,165	0,096	0,418
SGD	0,008	0,088	0,077	0,756	0,04	0,2	0,119	0,15
Random Forest	6,4e-5	0,008	0,001	0,998	0,007	0,082	0,006	0,855
Neural Network	0,006	0,078	0,063	0,807	0,036	0,189	0,080	0,241
Gradient Boosting	2,5e-5	0,005	0,001	0,999	0,004	0,064	0,006	0,914
AdaBoost	2,5e-5	0,005	0,001	0,999	0,004	0,063	0,005	0,914
kNN	4,9e-5	0,007	0,001	0,998	0,006	0,078	0,004	0,871

Встановлено, що для зразка # 16, попередньо згадані чотири методи є найкращими для цих двох досліджених наборів даних $\Delta\epsilon_{res}$ та ΔW_{dis} . Найменші значення MSE, RMSE та MAE отримано методами випадкових лісів, градієнтним бустінгом, AdaBoost та методом k найближчих сусідів як для $\Delta\epsilon_{res}$, так і для ΔW_{dis} . Найбільші значення $R^2 = 1$ також одержано вищезгаданими методами. Метрики моделі для зразка #17 наведено у таблиці 3.7.

Таблиця 3.7.

Метрики моделі для зразка # 17

Зразок #17	$\Delta\epsilon_{res}$				ΔW_{dis}			
	MSE	RMSE	MAE	R ²	MSE	RMSE	MAE	R ²
SVM	0,011	0,106	0,079	0,986	0,134	0,366	0,127	0,622
SGD	0,155	0,394	0,295	0,813	0,243	0,493	0,26	0,317
Random Forest	0	0,021	0,005	0,999	0,01	0,102	0,01	0,971
Neural Network	0,003	0,059	0,027	0,996	0,017	0,131	0,046	0,951
Gradient Boosting	0	0,017	0,008	1	0,004	0,062	0,009	0,989
AdaBoost	0	0,016	0,005	1	0,004	0,062	0,008	0,989
kNN	0,001	0,024	0,004	0,999	0,011	0,103	0,01	0,97

Виявлено, що як і в попередніх трьох випадках, метод k найближчих сусідів, AdaBoost, градієнтний бустінг та випадковий ліс дозволили одержати найкращі результати у термінах похибок прогнозування.

На рис. 3.5. подано залежності правдивих та передбачених значень розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} , отримані методом градієнтного бустінгу. Як видно з рис. 3.5, точки на кожному з рисунків знаходяться досить близько до бісектриси першого координатного кута, що підтверджує високу точність прогнозування.

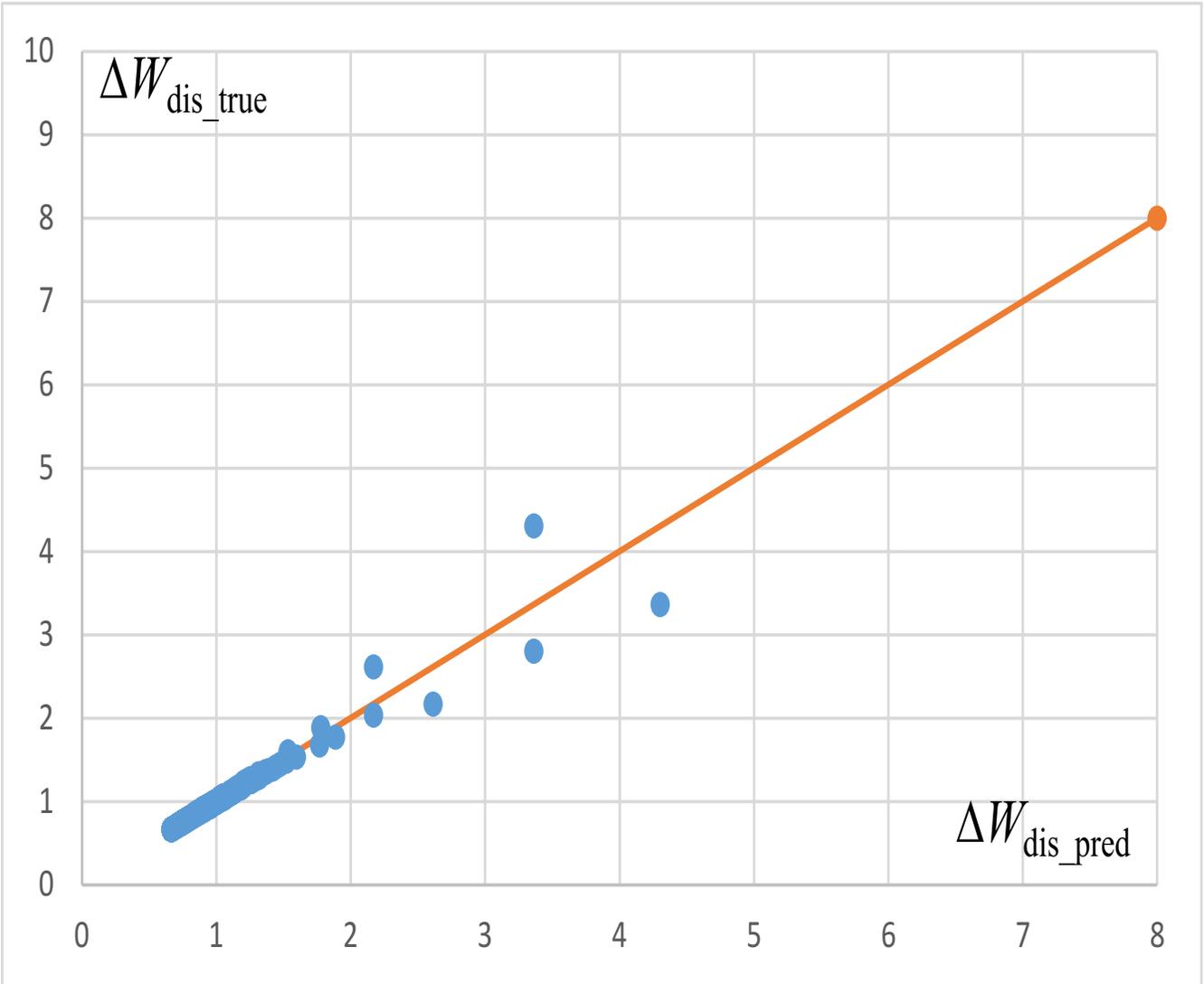


Рис 3.5. Залежності правдивих та передбачені значення розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} для зразка # 13, одержані методом градієнтного бустінгу

На рис. 3.6 подано залежності правдивих та передбачених значень розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} , отримані методом випадкових лісів.

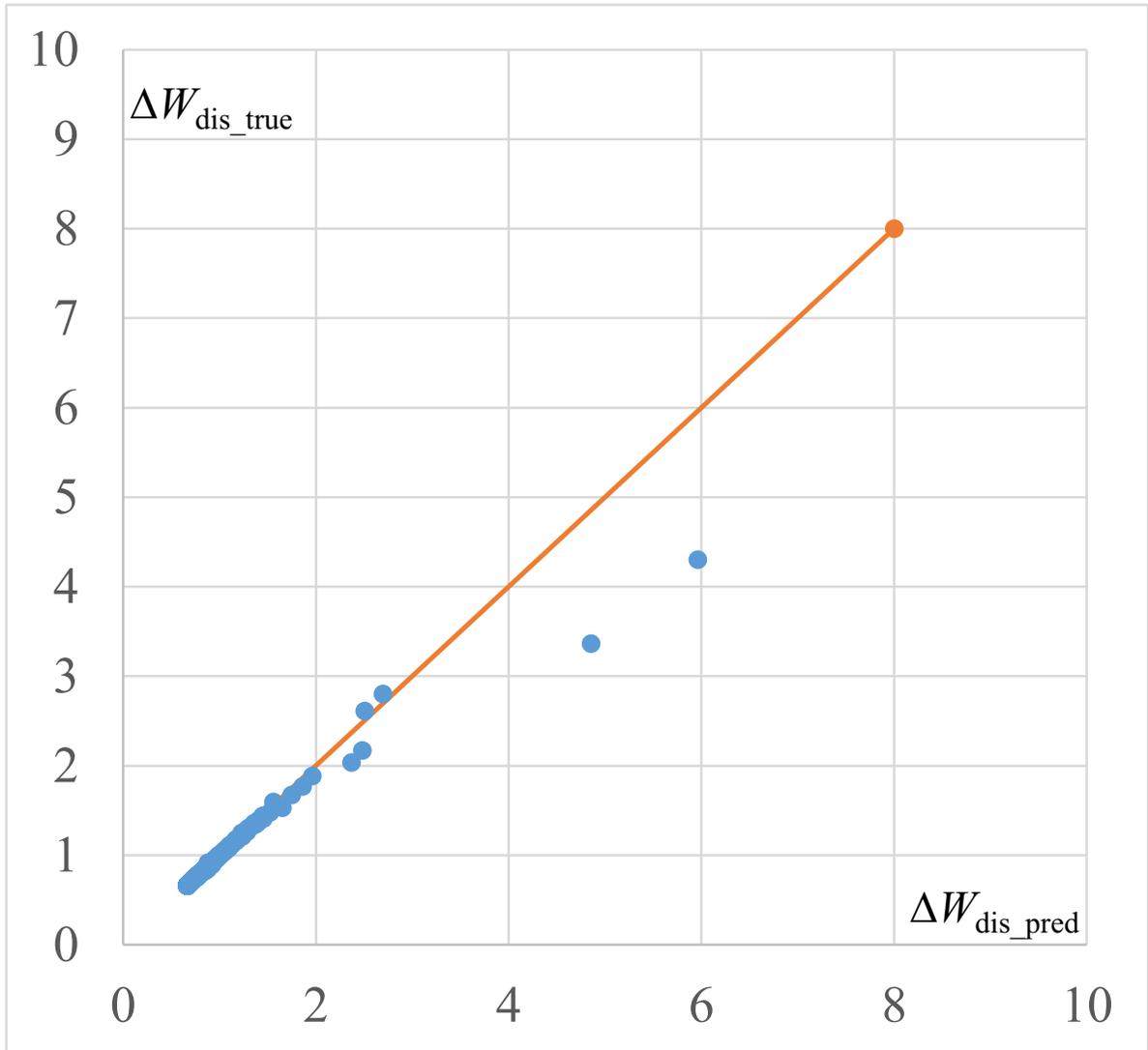


Рис 3.6. Залежності правдивих та передбачені значення розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} для зразка # 13 одержані методом випадкових лісів

На рис. 3.7. подано залежності правдивих та передбачених значень розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} , отримані методом Ada Boost.

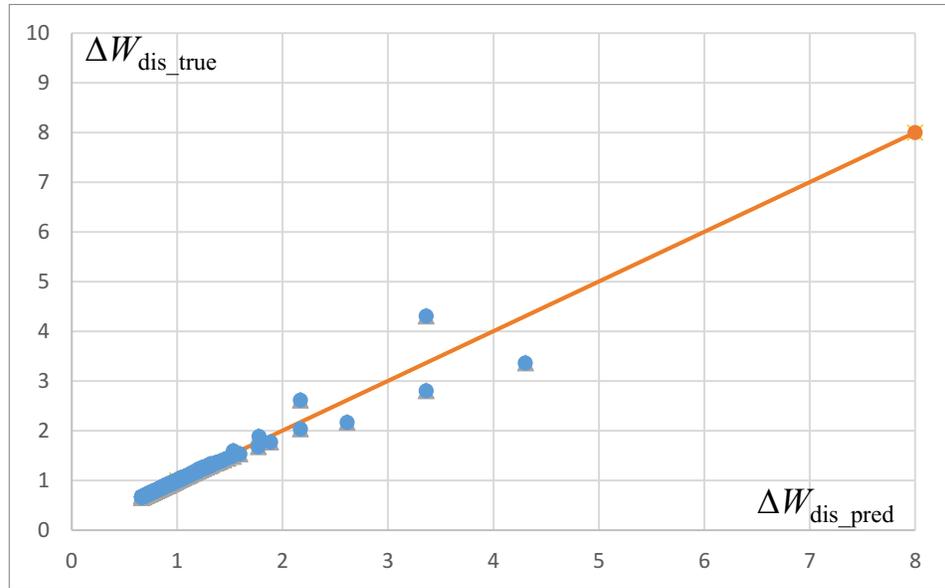


Рис 3.7. Залежності правдивих та передбачені значення розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} для зразка # 13, одержані методом Ada Boost

На рис. 3.8. зображено залежності правдивих та передбачених значень розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} , одержані методом k найближчих сусідів.

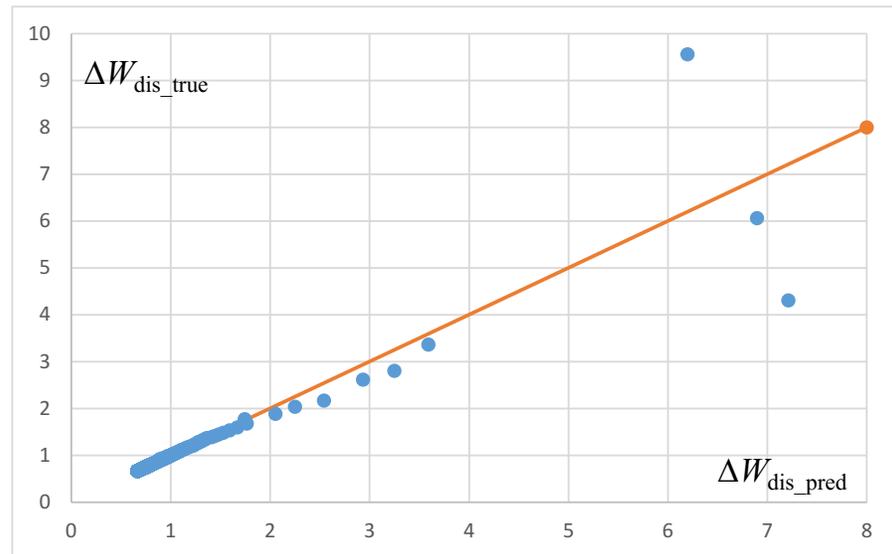


Рис 3.8. Залежності правдивих та передбачені значення розмаху розсіяної енергії ΔW_{dis} для зразка # 13, одержані методом k найближчих сусідів

На рис. 3.9. подано залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових деформацій $\Delta\varepsilon_{\text{res}}$, обчислених методом градієнтного бустінгу.

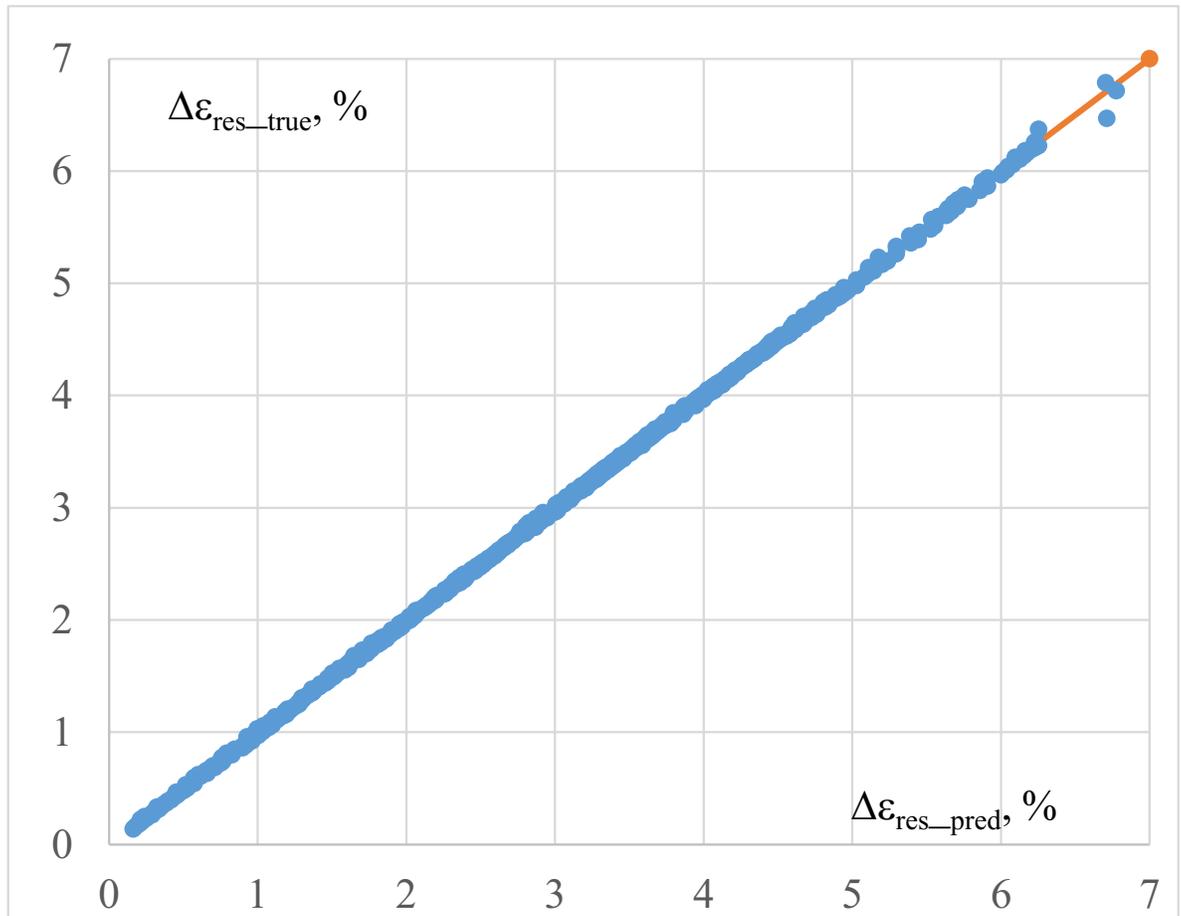


Рис. 3.9. Залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових напружень для зразка # 13, отримані методом градієнтного бустінгу

Як і в попередньому випадку, точки на графіку знаходяться дуже близько до бісектриси першого координатного кута, що підтверджує високу точність прогнозування.

На рис. 3.10. зображено залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових деформацій $\Delta\varepsilon_{\text{res}}$, обчислені методами випадкового лісу.

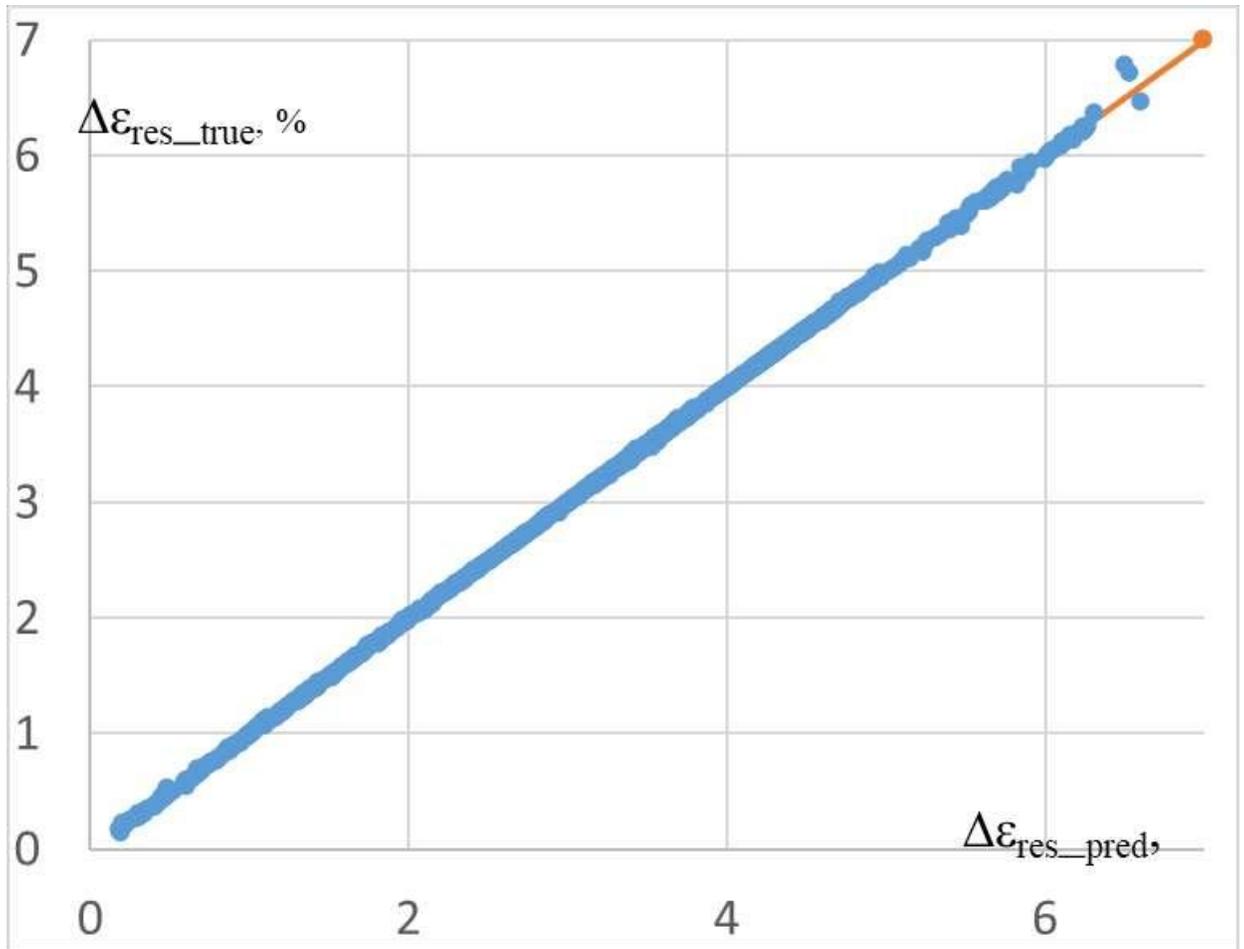


Рис. 3.10. Залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових напружень для зразка # 13, отримані методом випадкових лісів

Як і в випадку методу градієнтного бустінгу, точки на графіку розташовані дуже близько до бісектриси першого координатного кута, що свідчить про високу точність прогнозування.

На рис. 3.11. наведено залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових деформацій $\Delta\epsilon_{res}$, обчислених методом Ada Boosting

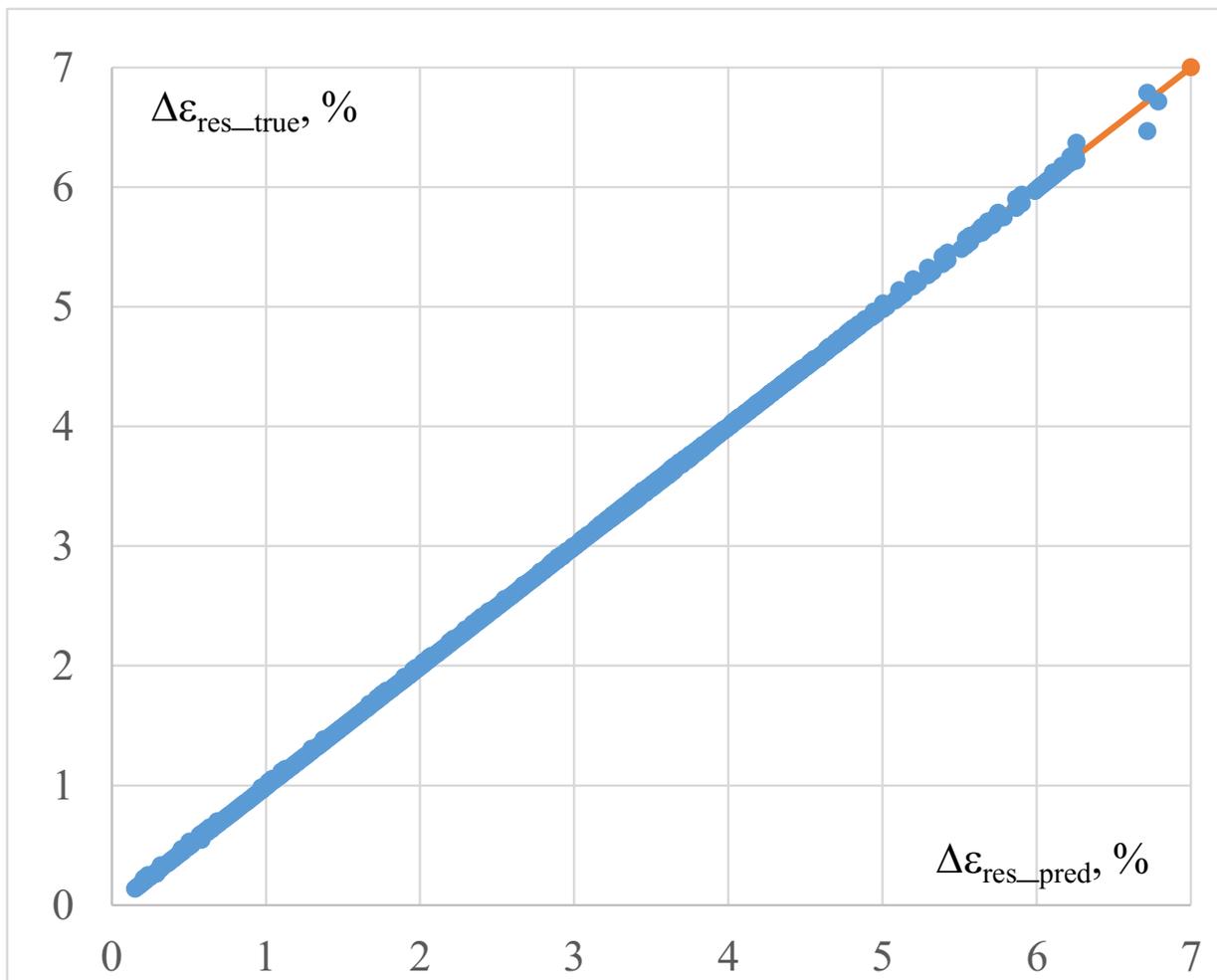


Рис. 3.11. Залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових напружень для зразка # 13, отримані методом Ada Boost

Як видно з рис. 3.11., точки на графіку розташовані дуже близько до бісектриси першого координатного кута, що свідчить про високу точність прогнозування.

На рис. 3.12. наведено залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових деформацій $\Delta\epsilon_{res}$, одержані методом k найближчих сусідів

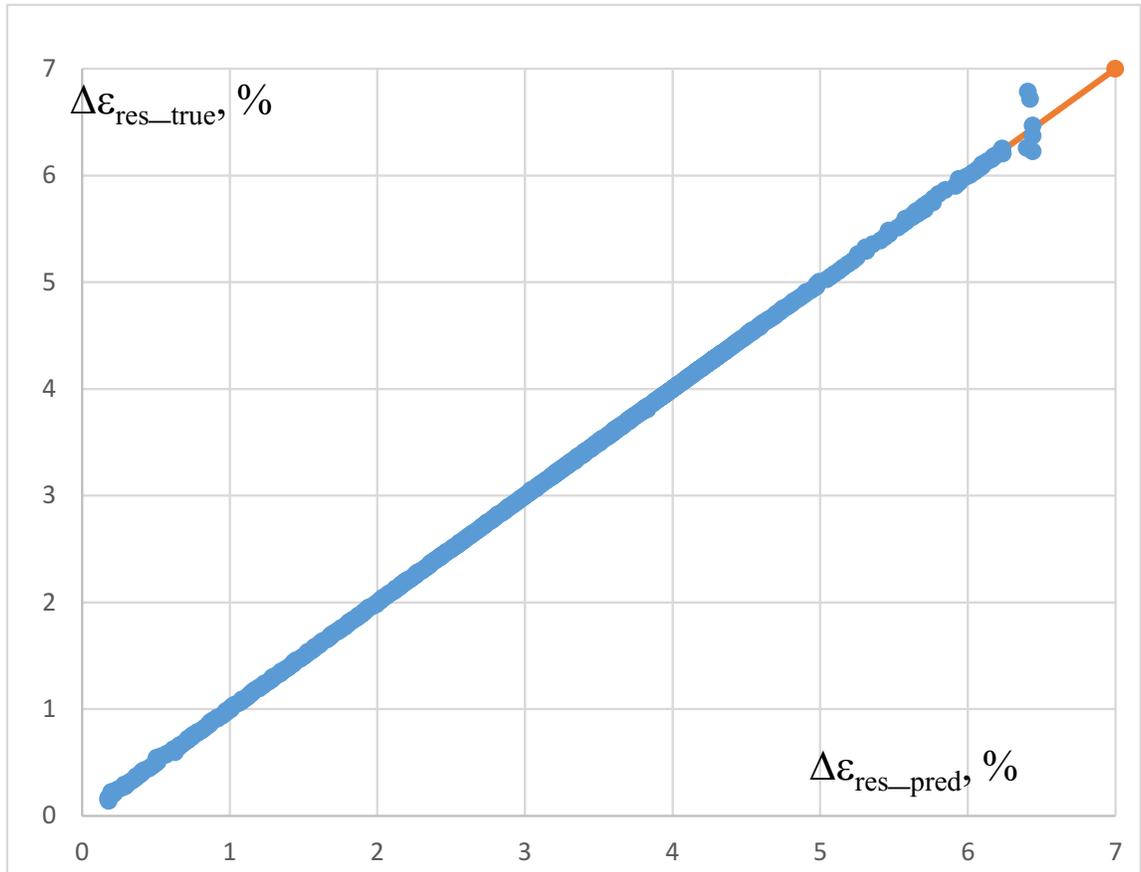


Рис. 3.12. Залежності правдивих та передбачених значень розмаху залишкових напружень для зразка # 13, отримані методом k найближчих сусідів

3.3. Моделювання втомної довговічності титанового сплаву

Розроблено модель НМ, яка дозволяє прогнозувати РВТ, аналізуючи залежності між довжиною тріщини a та кількість циклів навантаження N [123]. Модель навчалася на експериментальних даних, одержаних за різного коефіцієнта асиметрії циклу навантаження R , який визначають як відношення найменшого навантаження циклу до найбільшого. Застосування методів МН дозволило збільшити точність прогнозування і виявити приховані механізми, які керують РВТ.

Втомна довговічність є критичним параметром, який визначає надійність матеріалу конструкції. Глибоке розуміння цього феномену дозволяє прогнозувати поведінку матеріалів за циклічного навантаження, покращити його властивості, і

потенційно уникнути випадків катастрофічних руйнувань у складних технічних системах. Таким чином, важливими є застосування НМ для розв'язування задачі прогнозування РВТ в елементі конструкції, виготовленому із титанового сплаву. Поміж усіх застосовувань НМ у дослідженні втоми руйнування, прогнозування втоми довговічності є найбільш широко дослідженою тематикою (рис. 3.13.).

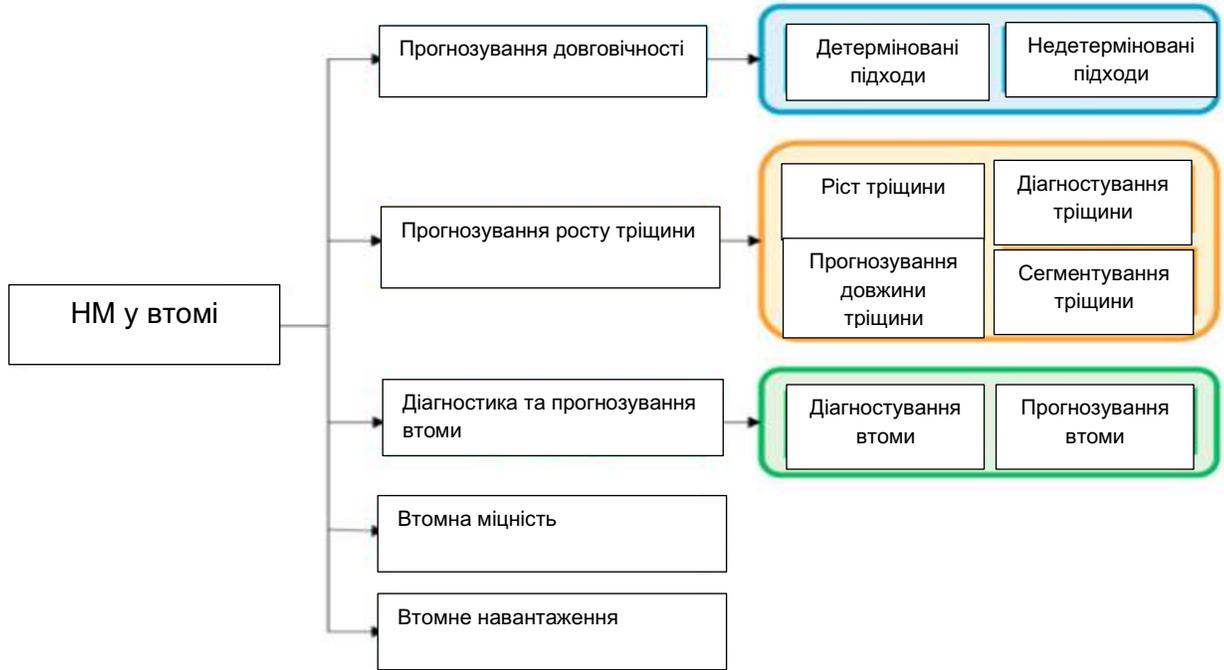


Рис. 3.13. Найбільш розповсюджені застосування НМ у дослідженні феномену втоми [124]

НМ є обчислювальною моделлю, котра складається з нейронів, сполучених між собою певним чином. НМ розв'язує складні задачі, такі, як класифікація, прогнозування, розпізнавання неочевидних, прихованих закономірностей, моделювання та ін. На рис. 3.14. показано приклад відносно простої НМ, котра складається з трьох шарів: вхідного шару, прихованого шару та вихідного шару. Інформація у НМ передається від вхідного шару через прихований шар до вихідного шару [118]. Додатково, механізм зворотного поширення помилки є фундаментальним алгоритмом, який застосовують для навчання НМ. Цей алгоритм оптимізує ваги та

зсуви у мережі, знаходячи мінімум функції втрат. Алгоритм працює, обчислюючи градієнт функції втрат та враховуючи кожен параметр нейронної мережі, починаючи з вихідного шару і рухаючись аж до вхідного шару. Зворотне поширення помилки є важливою складовою сучасних методів МН, котрий забезпечує гнучкість і надає потужності НМ. Загалом, НМ є одним з ключових інструментів сучасного МН і ШІ, які можуть розв'язувати величезну кількість задач із високою точністю.

Моделювання здійснювали у два етапи. На першому етапі, тестову вибірку випадково вибирав комп'ютер за допомогою генератора псевдовипадкових чисел із набору усіх експериментальних даних за різного коефіцієнта асиметрії циклу навантаження $R = 0,03; 0,1; 0,3$. На другому етапі, тренувальний набір даних, що складав 80% від загальної вибірки, містив експериментальні залежності довжини тріщини від кількості циклів навантаження для $R = 0,03$; тоді як тестовий набір даних, кількість якого складала 20% від загальної вибірки для $R = 0,03$, обрано для того, аби перевірити якість прогнозування.

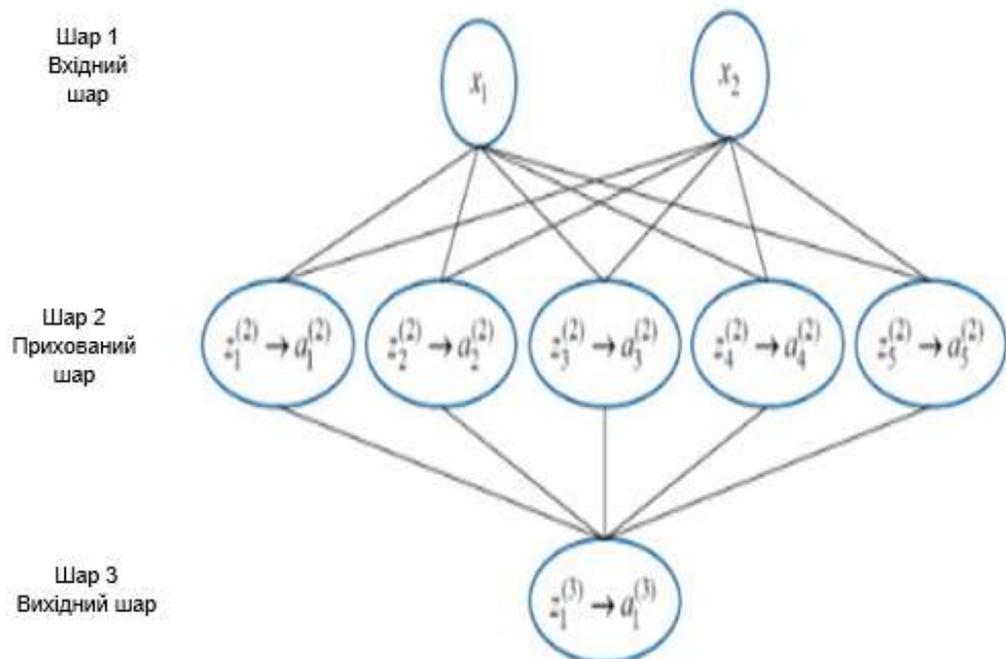


Рис. 3.14. Архітектура тришарової нейронної мережі [124]

Для того, аби розв'язати задачу прогнозування регресійної залежності, побудували НМ на основі багат шарового перцептрона, котрий ґрунтується на алгоритмі Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шеннона [125], [126], [127], [128]. Якість передбачень моделі оцінювали за такою метрикою, як сума квадратів помилок (SOS).

За похибку прогнозування обрано середню абсолютну відсоткову помилку (MAPE), яку обчислювали за наступною формулою:

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\varepsilon_{true}^{test}(i) - \varepsilon_{pred.}^{test}(i)|}{|\varepsilon_{true}^{test}(i)|} \cdot 100\% \quad (3.1)$$

MAPE – метрика, якою користуються для оцінки точності прогностичної моделі. Вона вимірює середню відсоткову помилку між актуальними, або правдивими значеннями, та передбачуваними значеннями. Це метрика є досить популярною, оскільки вона відносно проста її легко інтерпретувати. Ця метрика показує, наскільки передбачення моделі відрізняються від актуальних значень у термінах відсотків.

Довжину тріщини a прогнозували за різних коефіцієнтів асиметрії циклу навантаження $R = 0,03; 0,1; 0,3$. Експериментальні залежності довжини тріщини від кількості циклів навантаження вибирали з відкритих літературних джерел [124]. Загалом, набір даних поділили на дві нерівні частини. Досліджувана вибірка складалася із 154 елементів, із яких 70% випадково вибрано для навчального набору даних, а решту 30 % залишили для того, аби перевірити якість прогнозування. З'ясовано, що результати прогнозування добре узгоджуються із експериментальними даними. Вхідними даними моделей слугували кількість циклів навантаження N та коефіцієнт асиметрії циклу навантаження R , тоді як за вихідну змінну обрано довжину тріщини a .

На рисунку 3.15 зображено експериментальні та передбачені довжини тріщини. Як видно із вищезгаданого рисунка, експериментальні та прогнозовані довжини

тріщини корелюють між собою. А саме, точки знаходяться досить близько до бісектриси першого координатного кута, що свідчить про узгодженість даних та високу точність прогнозування.

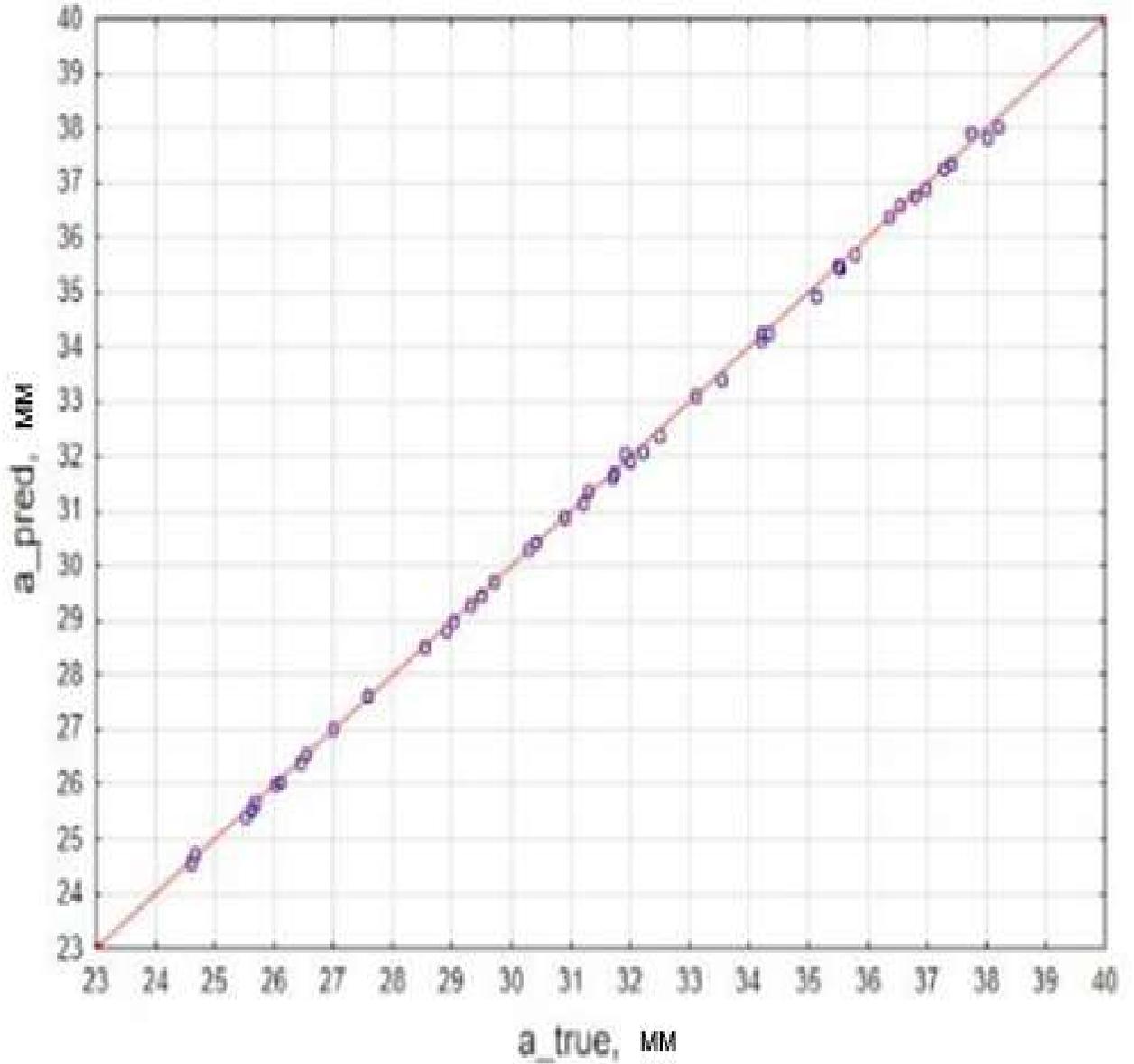


Рис. 3.15. Прогнозовані та експериментальні значення довжини тріщини, одержані методом НМ

На рисунку 3.16. зображено передбачені та експериментальні залежності довжини тріщини від кількості циклів навантаження $a-N$, побудовані за різного коефіцієнта асиметрії циклу навантаження $R = 0,03; 0,1; 0,3$ для тестового набору даних. Встановлено, що похибка прогнозування складала всього 0,2% на тестовому наборі даних.

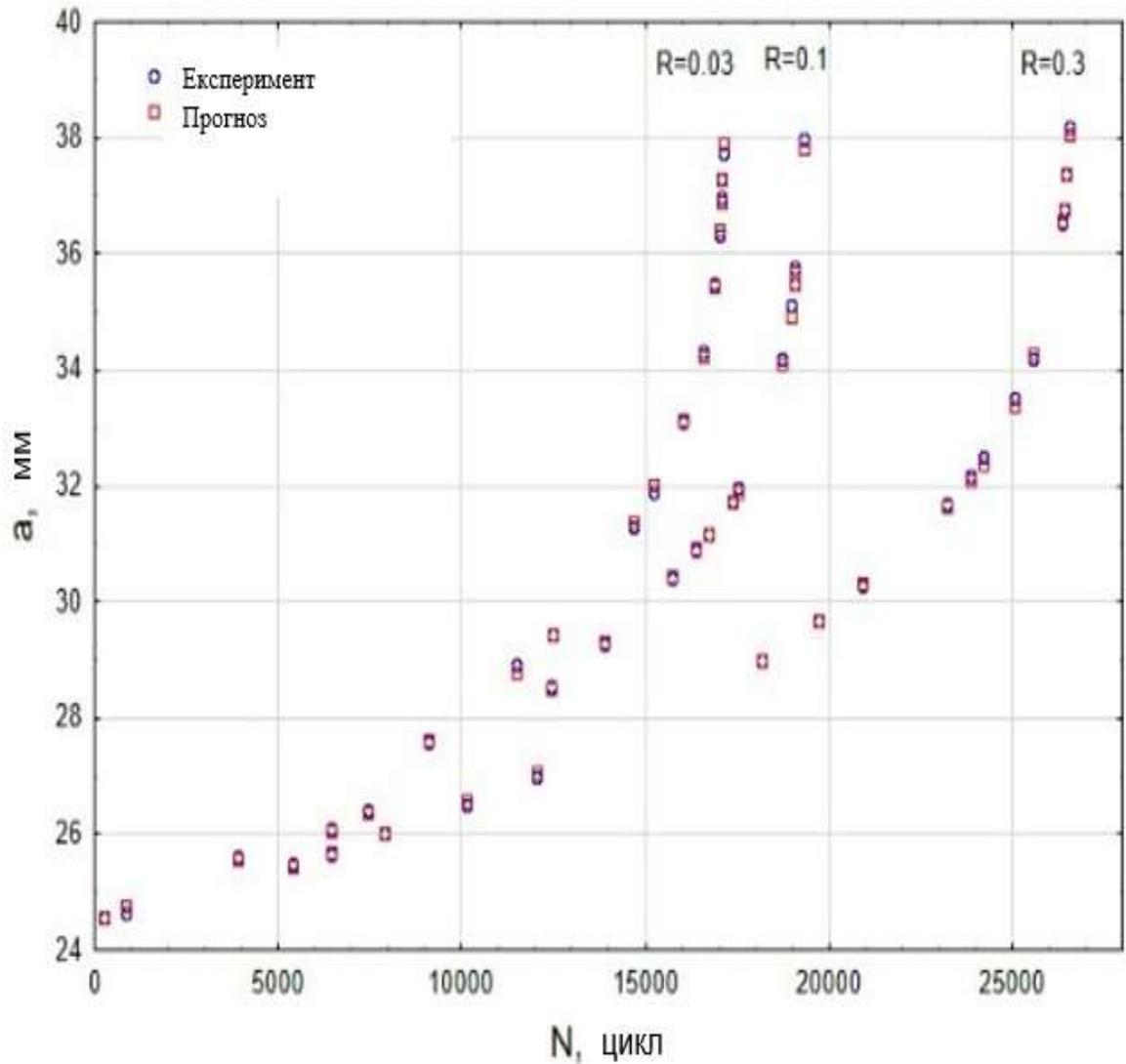


Рис. 3.16. Прогнозовані та експериментальні залежності довжини тріщини a від кількості циклів навантаження, отримані для різного коефіцієнта асиметрії циклу навантаження $R = 0,03; 0,1; 0,3$, побудовані методом НМ

На рис. 3.17. подано залежності довжини тріщини a від кількості циклів навантаження N , одержані, ґрунтуючись на трьох різних наборах даних, приміром, на тренувальних даних, позначених жовтими крапками. Це, власне, дані, на яких навчалася НМ. З рис. 3.17. чітко прослідковується базова закономірність зростання довжини тріщини із збільшенням кількості циклів навантаження. Зелені крапки позначають дані, які не подавали на вхід моделі, яку тренували, тобто, їх модель “не бачила”. Вони показують узгодженість між правдивими довжинами тріщини і значеннями, котрі отримано у результаті прогнозування. На додачу до того, прогноз, побудований методом НМ, позначено голубою лінією. Ця лінія показує прогнозування, отримане НМ для цілого діапазону даних, включаючи дані, які модель не бачила.

Загалом, нейронна мережа показує високу точність у задачі прогнозування довжини тріщини a . Прогнозовані значення (голуба лінія) майже збігаються із правдивими значеннями із обох наборів даних (жовті та зелені крапки). Відсутність значних відхилень між навчальними даними та даними, котрих модель не бачила при навчанні, підтверджує той факт, що модель не перенавчилася і добре узагальнює. Також слід відзначити, що, як видно із рис. 3.18, залежність між довжиною тріщини a та кількістю циклів до руйнування N є нелінійною. На початкових стадіях РВТ, тобто, за низьких значень N , швидкість РВТ доволі повільна, однак із зростанням кількості циклів навантаження N , процес РВТ пришвидшується, що є типовим для РВТ.

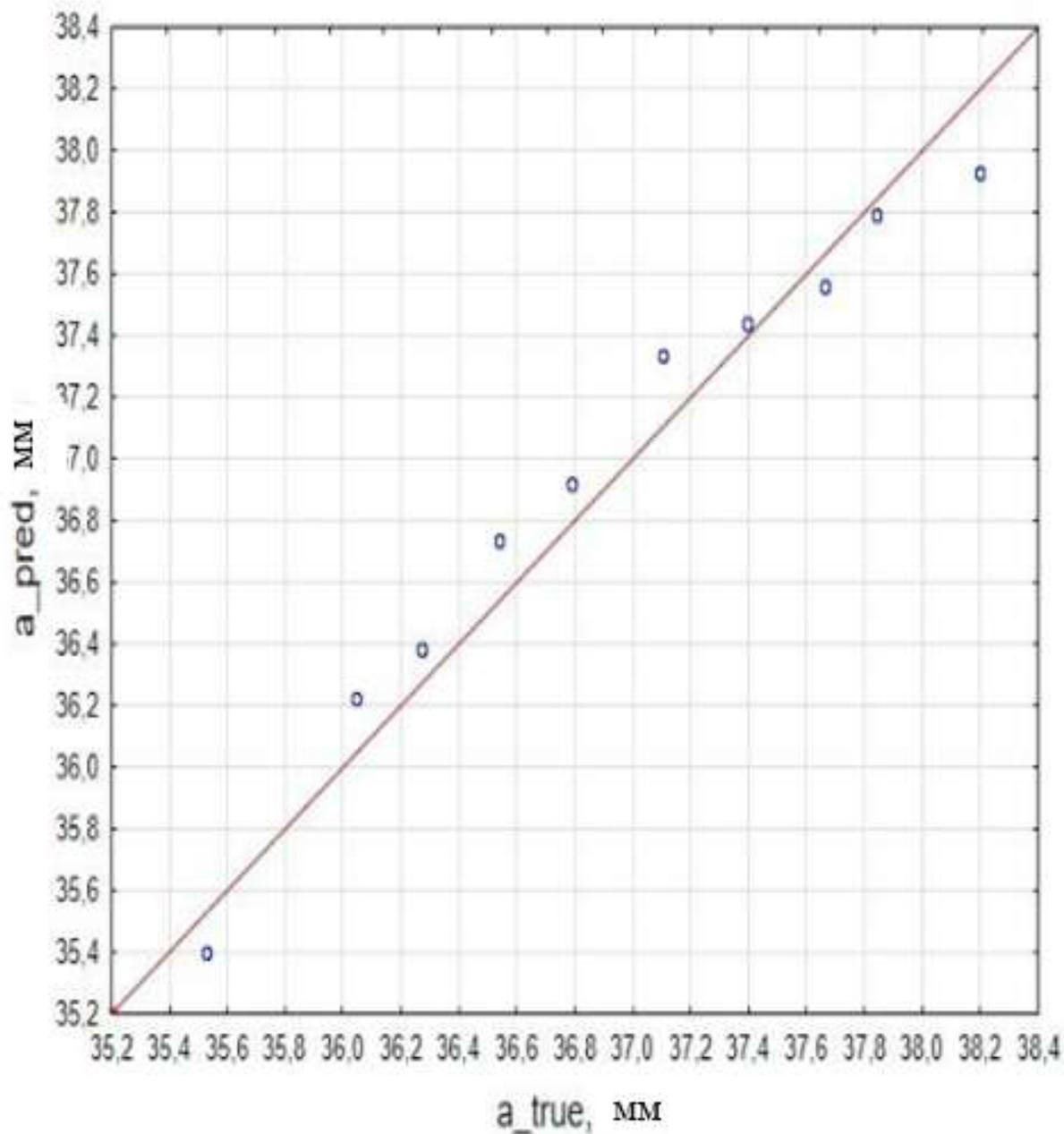


Рис. 3.17. Прогнозовані та експериментальні залежності довжини тріщини, отримані для коефіцієнта асиметрії циклу навантаження $R = 0,03$, побудовані методом НМ

Стабільно висока точність моделі для даних, яких вона попередньо не бачила, підтверджує той факт, що НМ змогла вивчити фундаментальні фізичні закони, які

визначають швидкість РВТ. Похибка, що становила 0,4%, отримана методом НМ на тестовому наборі даних для коефіцієнта асиметрії циклу навантаження $R = 0,03$.

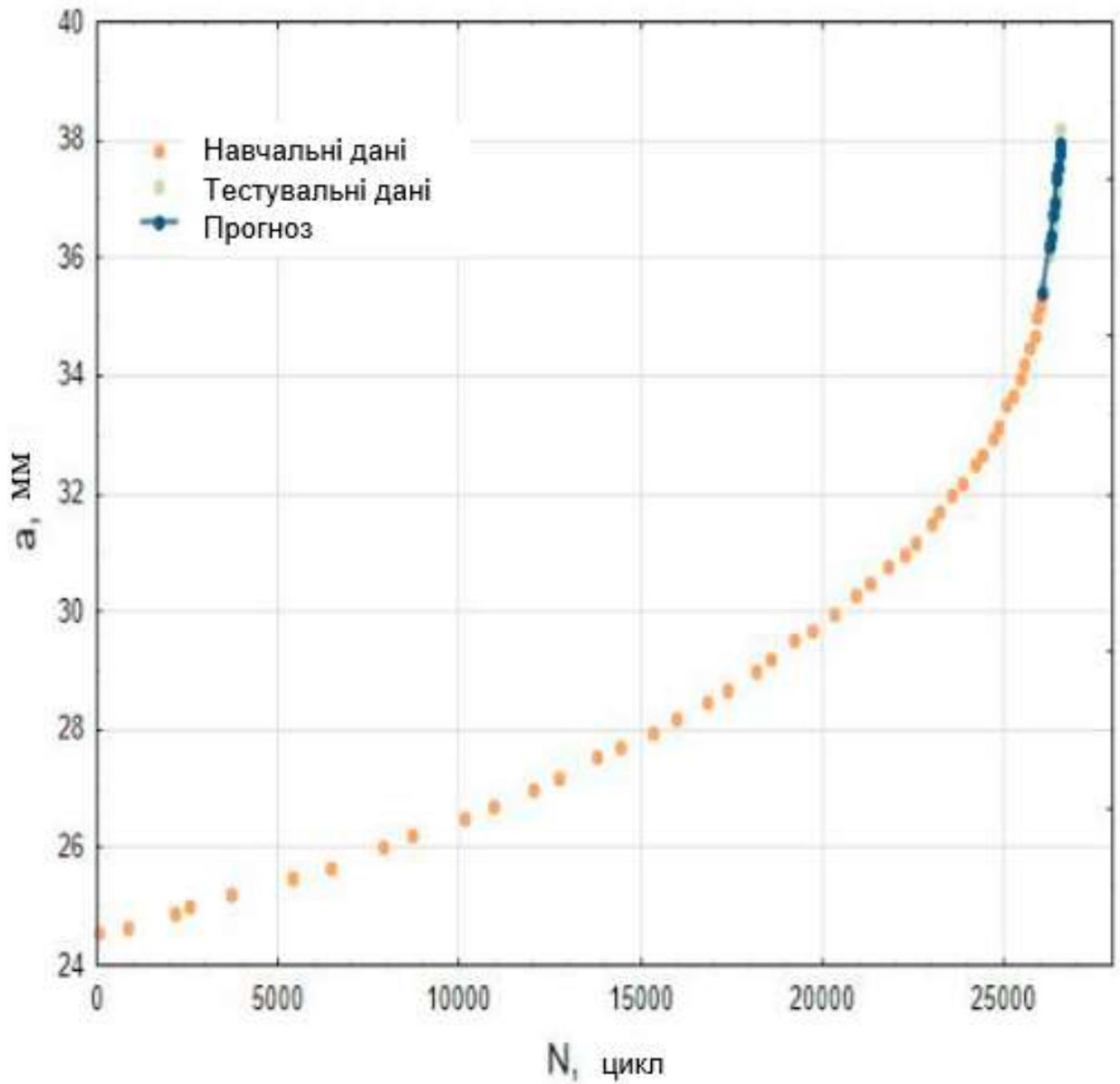


Рис. 3.18. Прогнозовані та експериментальні залежності довжини тріщини a від кількості циклів навантаження $R = 0,03$, побудовані методом НМ

Параметри сконструйованих НМ для двох вищезгаданих етапів наведено у Таблиці 3.8.

Таблиця 3.8.

Параметри нейронної мережі

Коефіцієнт асиметрії циклу навантаження R	Назва мережі	Алгоритм навчання	Функція помилки	Функція активації прихованого шару	Функція активації вихідного шару
$R = 0,03; 0,1; 0,3$	MLP 2-30-1	BFGS	SOS	Логарифмічна	Експоненціальна
$R = 0,03$	MLP 1-25-1	BFGS	SOS	Тангенціальна	Ідентична

У таблиці 3.8 наведено топології двох НМ, які застосовували для моделювання впливу коефіцієнта асиметрії циклу навантаження R на залежність довжини тріщини a від кількості циклів навантаження N . НМ MLP 2-30-1 володіє більшою гнучкістю, оскільки вона враховує декілька значень коефіцієнта асиметрії циклу навантаження R . На противагу їй, НМ MLP 1-25-1 побудовано і оптимізовано для одного конкретного значення коефіцієнта асиметрії циклу навантаження $R = 0,03$, що дозволяє досягнути вищої точності при розв'язуванні цієї задачі.

3.4. Моделювання гістерезисної поведінки СПФ

Для прогнозування поведінки сучасних функціональних матеріалів та зменшення кількості експериментальних досліджень, зазвичай, будують їхні описові математичні моделі, що дають можливість подальшого розрахунку зразків за різних

умов їхньої роботи, зокрема і за повторюваних навантажень. Проте без експериментальних даних вже ж у жодному разі не можна обійтися, адже будь-яка математична модель містить певні сталі, що характеризують фізико-механічні властивості матеріалу за конкретних зовнішніх умов. У процесі експериментальних досліджень кривих деформування зразків при однократному навантажуванні з'ясовано, що вони мають характер, властивий для пружно-пластичного деформування матеріалу зі зміцненням. Візуально встановлено, що криву деформування можна апроксимувати двома прямими відрізками за формулою [129]:

$$\sigma = \begin{cases} E_1 \varepsilon, & \sigma < \sigma_{pl} \\ E_2 \varepsilon + \left(1 - \frac{E_2}{E_1}\right) \sigma_{pl}, & \sigma \geq \sigma_{pl}. \end{cases} \quad (3.2)$$

де E_1, E_2 – сталі модулі матеріалу; σ_{pl} – напруження, за яких відбувається зміна характеру кривої навантажування.

Математично очевидно, що параметри E_1, E_2 можна визначити із (3.2) як похідну

$$E_i = \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}, \quad (3.3)$$

Але у випадку набору експериментальних даних числове обчислення (3.3) має дуже малу точність унаслідок похибки визначення контрольованих величин у кожній із експериментальних точок кривої деформування. Тому у цьому дослідженні для обчислення параметрів залежності (3.2) запропоновано підхід, що полягає в апроксимації експериментальних даних залежністю (3.2) за допомогою методу найменших квадратів. Для цього складемо функціонал квадратів відхилень у вигляді:

$$F = \sum_{i=1}^m (E_1 \varepsilon_i - \sigma_i)^2 + \sum_{i=m+1}^N (E_2 (\varepsilon_i - \varepsilon_m) + E_1 \varepsilon_m - \sigma_i)^2. \quad (3.4)$$

Де N – кількість експериментально визначених точок кривої навантажування; $1 < m < N$ – проміжна точка, у якій $\sigma \approx \sigma_{pl}$. Мінімізувавши функціонал (3.4) за величинами E_1 , E_2 , отримаємо таку систему лінійних алгебричних рівнянь:

$$\begin{aligned} E_1 \left(\sum_{i=1}^m \varepsilon_i^2 + (N-m) \varepsilon_m^2 \right) + E_2 \varepsilon_m \sum_{i=m+1}^N (\varepsilon_i - \varepsilon_m) &= \sum_{i=1}^m \sigma_i \varepsilon_i - \varepsilon_m \sum_{i=m+1}^N \sigma_i, \\ E_1 \varepsilon_m \sum_{i=m+1}^N (\varepsilon_i - \varepsilon_m) + E_2 \sum_{i=m+1}^N (\varepsilon_i - \varepsilon_m)^2 &= \sum_{i=m+1}^N \sigma_i (\varepsilon_i - \varepsilon_m). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Систему (3.4) розв'язуємо для кожного зі значень $1 < m < N$, обчислюючи при цьому функціонал (3.3). Розв'язком вважаємо таке m , для якого (3.4) приймає найменше значення. Аналогічно можна визначити і відповідні параметри відрізків, що апроксимують криву розвантаження зразка (модуль E_1). Як виявилось під час експериментальних досліджень, вони є дещо відмінними.

Отриманими параметрами скористалися у моделі гістерезисної поведінки матеріалу, у якій враховано пружно-пластичну модель матеріалу з лінійним зміцненням, а також пам'ять про деформації та криву навантажування на попередньому кроці.

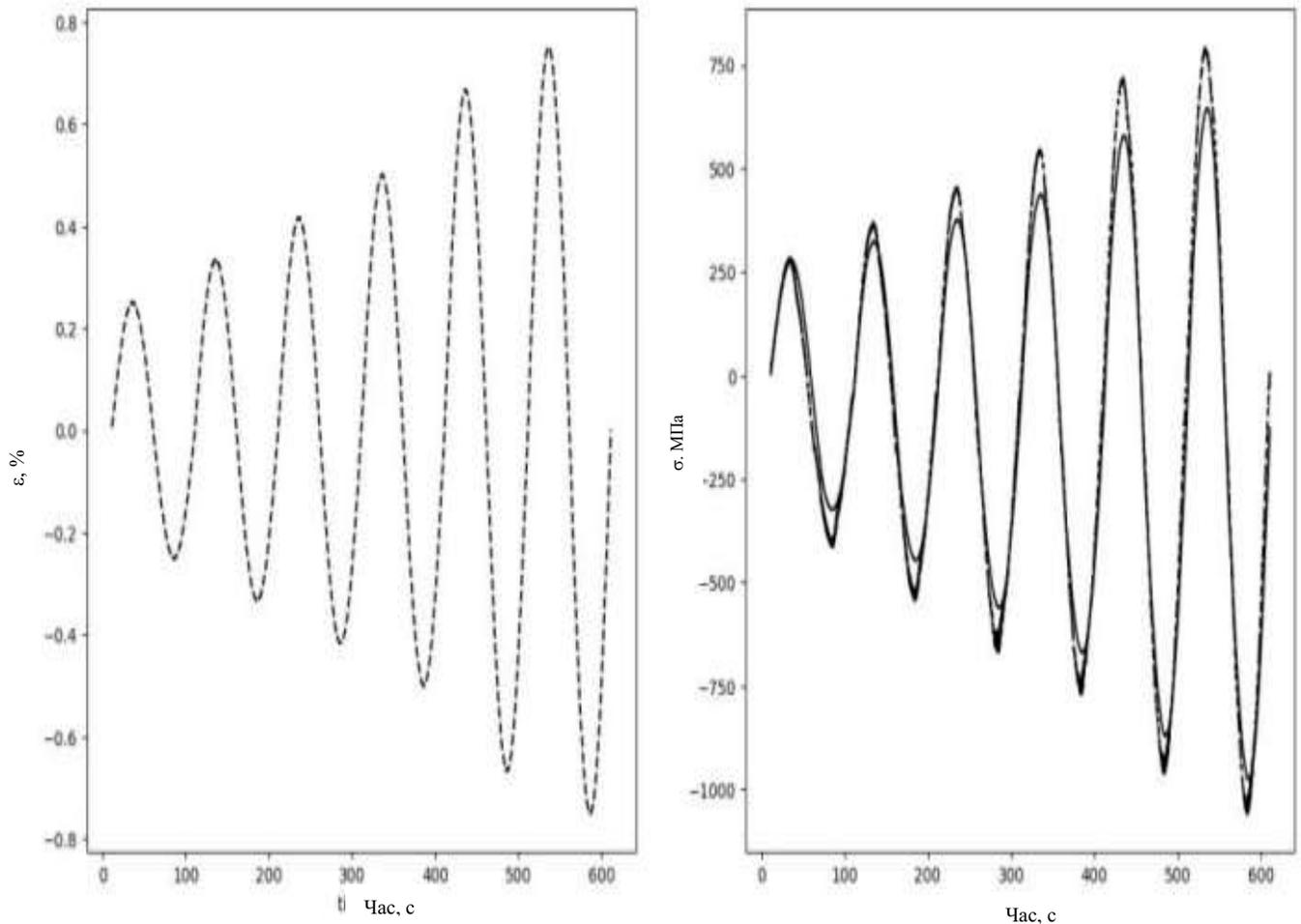


Рис. 3.19. Залежність експериментально (штрихові криві) та обчислених за отриманою моделлю деформацій та напружень у зразку

Підхід (3.2)–(3.5) разом із моделлю гістерезисної поведінки матеріалу закодовано у комп'ютерну програму мовою Python. Результати розрахунків, здійснених на основі експериментальних значень залежності деформацій від часу, у порівнянні із експериментально обчисленими значеннями напружень, зображено на рис. 3.19. У розрахунках характер навантажування вважався квазістатичним, тобто, інерційні ефекти не враховувалися унаслідок їхньої надзвичайно малої величини.

Із рис. 3.19 видно досить добру узгодженість побудованих за отриманою гістерезисною моделлю напружень із експериментальними даними, хоча створена модель і дає дещо занижені значення при пікових значеннях деформацій. Це можна

пояснити застосованою кусково-лінійною моделлю опису поведінки матеріалу. Експериментально (штрихові криві) та теоретично (суцільні лінії) отримані залежності напружень від деформацій із явним відображенням гістерезисного характеру процесів повторюваного деформування зображено на рис. 3.20.

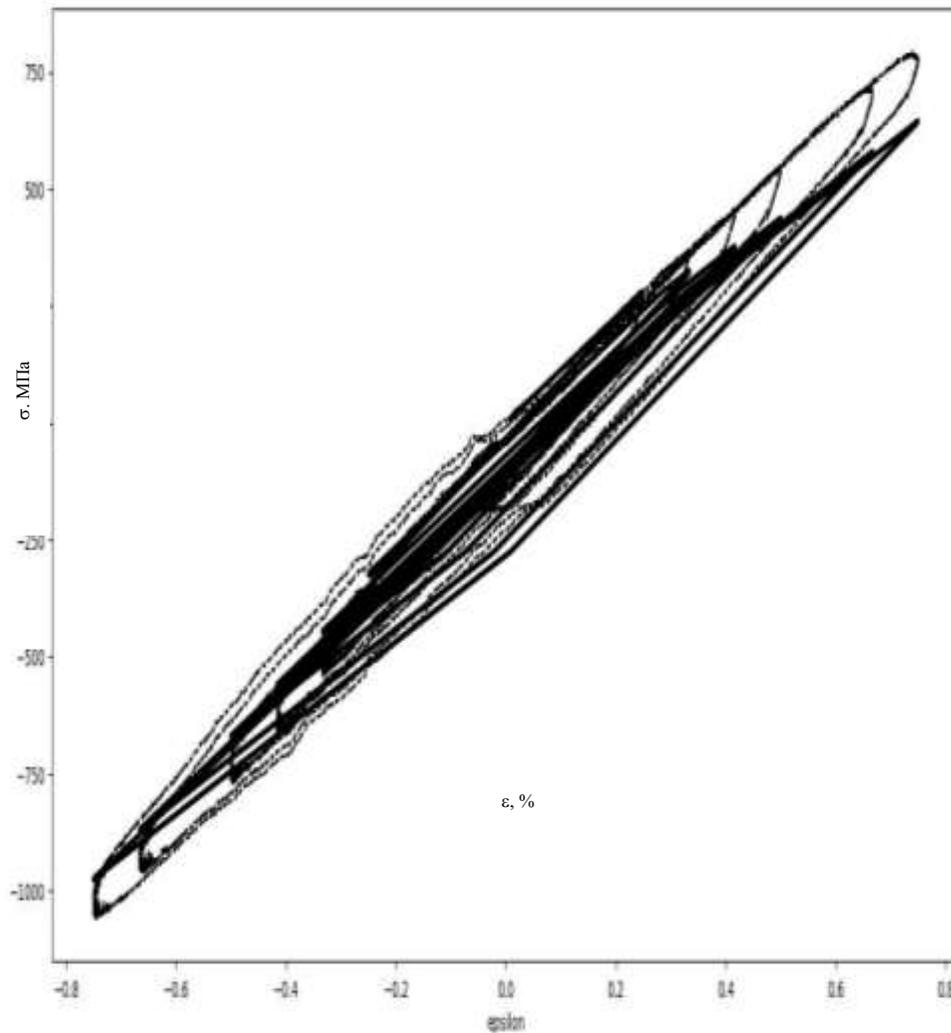


Рис. 3.20. Гістерезисний характер кривих повторюваного деформування

Із рис. 3.20 також видно досить добру узгодженість отриманих кривих, хоча експериментальні дані дещо більш витягнуті уздовж вертикальної осі, що можна пояснити нелінійною залежністю напружень від деформацій для реального матеріалу.

3.5. Моделювання функціональних властивостей СПФ з урахуванням частоти навантаження

Експериментальний набір даних взято із праці [65]. Цей набір даних містив петлі гістерезису для шести частот циклу навантаження: 0,1; 0,5; 1; 5; 7 та 10 Гц. Вхідні дані склалися з наступних ознак: напруження σ (МПа), номер циклу навантаження N та частота навантаження f (Гц). Ґрунтуючись на експериментальних даних, для кожної частоти циклу навантаження, та для кожного циклу навантаження, обчислено розсіяну енергію за наступним алгоритмом [130]. Спочатку, кожен цикл поділено на дві частини – навантаження та розвантаження. Оскільки експериментальні дані часто «зашумлені», застосовано додаткове згладжування. Скрипт попередньої обробки даних реалізовано мовою програмування високого рівня Python 3.10. А саме, для того, аби усунути існуючі шуми, скористалися згладжувачем LOWESS [131] з непараметричного модуля statsmodels. Згладжувач LOWESS здійснює зважену локальну лінійну інтерполяцію. Згладжувач LOWESS — непараметричний метод регресії, який застосовують для побудови гладкої лінії або кривої через експериментальні точки. Він візуально представляє загальні тренди та патерни у наборі даних без того, аби здійснювати строгі припущення про природу обраного набору даних. Локальне зважування означає, що задачу регресії розв’язують для малих підмножин даних, з точками, ближчими до центральної точки цієї підмножини, котрі отримують більшу вагу у розрахунку загладжуваного значення. Замість того, аби будувати одну лінію або криву для усього набору даних, метод LOWESS апроксимує набір моделей регресії для малих, локалізованих частин даних. Для кожної точки з кінцевої гладкої кривої, регресія будується, ґрунтуючись на довколишніх точках. Точкам, котрі знаходяться ближче до точки, котру згладжують, надають більшої ваги, аніж тим, котрі розташовані більш віддалено. Зважені регресійні залежності поєднуються для того, аби побудувати гладку, гнучку криву, котра проходить через дані, при цьому зберігає існуючі тренди і мінімізуючи шуми.

Згладжувач LOWESS може бути більш стійким до викидів, застосувавши стійку зважуючу функцію, яка в подальшому присвоює малі ваги екстремальним точкам, які можуть спотворити тренд.

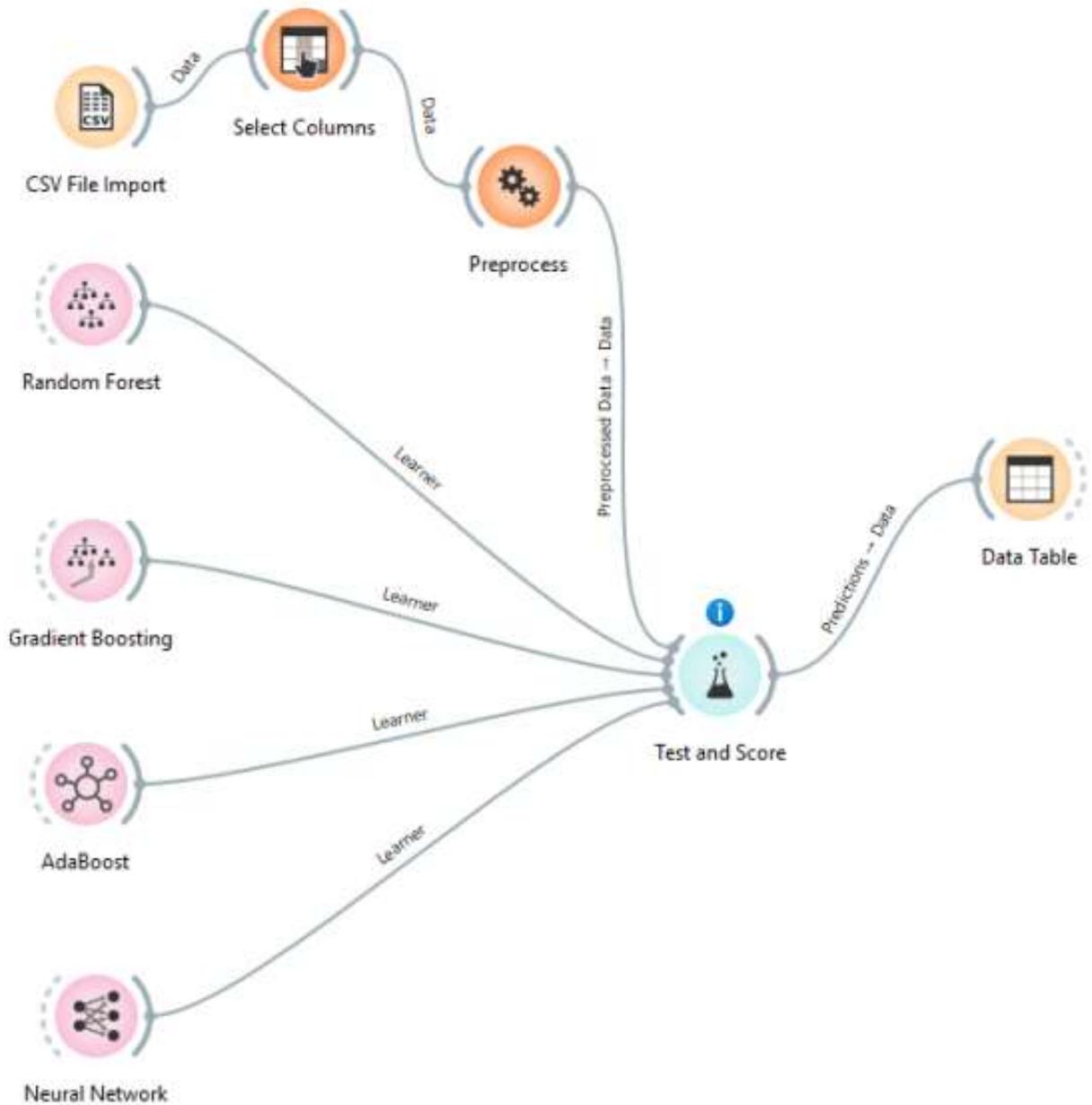


Рис. 3.21. Схема моделі, побудована у програмному комплексі Orange

Після згладжування даних, застосовано числове інтегрування методом трапецій для того, аби обчислити площу під петлею гістерезису відповідного циклу навантаження, тобто, розсіяну енергію W_{dis} . Для того, аби збільшити набір даних, точки набору даних інтерпольовано модифікованим методом інтерполяції Akima (makina) [86]. Даний метод ефективно інтерполює, уникаючи крайніх випадків, коли як чисельник, так і знаменник виявляються рівними нулеві.

Після того, як експериментальні дані попередньо оброблено та додатково збільшено, отримали набір даних, котрий містив дві вхідні ознаки та одну вихідну. За вхідні ознаки слугували частота f (Гц) та кількість циклів навантаження N . За вихідну ознаку обрано розсіяну енергію W_{dis} (МДж/м³). Набір даних містив 10761 точку і складався з даних для шести частот навантаження, а саме, 0.1; 0.5; 1; 5; 7 і 10 Гц. Дані також перетворили до інтервалу [0,1]. Для того, аби побудувати регресійні моделі методами машинного навчання, скористалися програмним комплексом Orange 3.38.

Моделі навчали, скориставшись методом крос-валідації з $k = 5$. Загалом, побудовано чотири моделі, ґрунтуючись на методах Random Forest, AdaBoost, Gradient Boosting та Neural Network. Навчання моделі здійснювали на персональному комп'ютері з процесором тринадцятого покоління Intel Core i7-1365U з частотою 1800 МГц, який має десять ядер і дванадцять логічних процесорів і 32 ГБ RAM.

Блок-схему моделі, котру побудовано в програмному комплексі Orange, наведено на рис. 3.21.

У таблиці 3.9. наведено метрики моделей та їх швидкодію.

Як видно з таблиці 3.9, найкращі результати показали ансамблеві методи, такі як AdaBoost та Random Forest. Приміром, MAPE методу AdaBoost становила лише 0,074, тоді як MAPE Random Forest становила 0,144.

Також встановлено, що метод Gradient Boosting та Neural network не є підходящими для досліджуваного набору даних, оскільки помилки досить великі, тому їх не можна застосовувати для розв'язування такої задачі.

Таблиця 3.9.

Метрики моделей та їх швидкодія

Модель	Час тренування моделі, с	Час тестування моделі, с	MSE	RMSE	MAE	MAPE
AdaBoost	2,413	0,108	10816,392	104,002	1,698	0,074
Random Forest	0,833	0,026	13377,201	115,660	2,476	0,144
Gradient Boosting	2,546	0,014	13826,829	117,588	5,595	47,103
Neural Network	17,234	0,021	13902,953	117,911	18,427	222,660

3.6. Висновки до розділу 3

Змодельовано функціональні властивості NiTi СПФ методами машинного навчання з учителем. Моделювання здійснено у програмному комплексі аналізу даних Orange. Функціональні властивості СПФ, а саме, розмах розсіяної енергії, деформацій та напружень змодельовано методами kNN, AdaBoost, Random Forest, Gradient Boosting, Neural Network. Отримано відповідні регресійні залежності і здійснено крос-валідацію результатів. Отримано помилки результатів і коефіцієнт детермінації моделюванням методами МН з учителем для розмаху енергії, напружень та деформацій залежно від кількості циклів навантаження, відповідно. Для кожної фізичної величини, найкращі результати у термінах помилок методу одержано методом k найближчих сусідів.

Змодельовано та отримано регресійні залежності розмаху залишкових деформацій та розмаху розсіяної енергії для чотирьох досліджуваних зразків методом

k найближчих сусідів, а також методом опорних векторів, методом стохастичного градієнтного спуску, випадковими лісами, нейронними мережами, градієнтним бустінгом та AdaBoost. Серед усіх досліджених методів, метод k найближчих сусідів, AdaBoost, градієнтний бустінг і випадковий ліс показали найкращі результати у термінах похибки прогнозування.

Застосовано НМ для передбачення втомної довговічності елементів конструкцій, виконаних із титанових сплавів за дії циклічного навантаження. Зокрема, запропонована модель, котра ґрунтується на багатошаровому персептроні, прогнозує довжину втомної тріщини з високою точністю. Помилка прогнозування не перевищує 0,4% для тестового набору даних, що вказує на можливість моделі відтворювати фізичні закони. НМ показала здатність адаптуватися до різних коефіцієнтів асиметрії циклу навантаження $R = 0,03; 0,1; 0,3$ та умов навантажування.

Відсутність значних відхилень похибок між навчальними та тестовими наборами даних підтверджує той факт, що модель не схильна до перенавчання і добре узагальнює на нових даних. Запропонована модель дозволяє точно оцінювати залишковий ресурс матеріалу елемента конструкції і робити висновки про ремонт та функціонування елемента конструкції. Таким чином, побудована НМ дозволяє поєднувати традиційні моделі механіки руйнування з методами машинного навчання, збільшуючи точність прогнозування та зменшуючи залежність від розкиду експериментальних даних. Тобто, запропонована модель є надійним інструментом для оцінки втомної поведінки елементів конструкцій за циклічного навантаження, зменшуючи ризик катастрофічних руйнувань в умовах експлуатації реального світу

Побудовано математичну модель опису петель гістерезису сплаву із пам'яттю форми, яка ґрунтується на методі найменших квадратів. Запропонований підхід дозволяє отримати залежності гістерезисної поведінки матеріалу на основі експериментальних даних. Встановлено, що модель досить добре описує діаграми деформування сплавів із пам'яттю форми.

Змодельовано розсіяну енергію нікельтитанового сплаву СПФ методами машинного навчання з учителем, врахувавши частоту циклу навантаження. Набір даних складався з петель гістерезису для шести частот циклу навантаження 0.1; 0.5; 1; 5; 7 та 10 Гц. Вхідні дані склалися з наступних ознак: напруження σ (МПа), номер циклу навантаження N , та частота циклу навантаження f (Гц). Грунтуючись на цих даних, для кожного циклу навантаження і для кожної частоти навантаження, обчислено розсіяну енергію.

Для того, аби додатково збільшити набір даних, його інтерпольовано модифікованим методом інтерполяції *makima*. Загалом, побудовано чотири моделі машинного навчання методами Random Forest, AdaBoost, Gradient Boosting та Neural Network.

Встановлено, що метод Gradient Boosting та Neural Network не підходять для цього набору даних, оскільки помилки прогнозування є досить великими. Тому, згадані вище методи не підходять для розв'язування конкретної задачі.

Найкращі результати показали ансамблеві методи, такі як AdaBoost та Random Forest. Приміром, MAPE методу AdaBoost становила тільки 0,074, тоді як MAPE методу Random Forest складала 0,144.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі запропоновано нові підходи до моделювання функціональних властивостей та довговічності сплавів, ґрунтуючись на методах машинного навчання з учителем. Отримано такі основні результати:

1. Змодельовано функціональні властивості NiTi сплаву з пам'яттю форми (СПФ) методами машинного навчання з учителем у середовищі Orange; отримано регресійні залежності та проведено крос-валідацію результатів.
2. Для прогнозування розмаху енергії, напружень та деформацій найкращі результати показав метод k найближчих сусідів, а також ансамблеві методи AdaBoost, Gradient Boosting та Random Forest.
3. Запропоновано модель прогнозування довжини втомної тріщини у титанових сплавах на основі багат шарового персептрона; досягнуто високої точності прогнозування з похибкою не більше 0,4%.
4. Встановлено, що модель добре узагальнює результати на нових даних, не схильна до перенавчання та дозволяє оцінювати залишковий ресурс матеріалу, що є важливим для практичного застосування у конструкціях.
5. Побудовано математичну модель опису петель гістерезису СПФ методом найменших квадратів із використанням кусково-лінійних функцій; підтверджено її адекватність для опису діаграм деформування.
6. Змодельовано розсіяну енергію NiTi СПФ для різних частот циклічного навантаження; встановлено, що ансамблеві методи AdaBoost та Random Forest забезпечують найменші похибки прогнозування.
7. Розроблено методики попередньої обробки та аугментації даних (нормалізація, кубічні сплайни, інтерполяція Akima та makima), які дозволили підвищити ефективність побудови моделей машинного навчання.

8. Запропоновано загальну методику прогнозування функціональних властивостей СПФ у вигляді блок-схеми, що відображає основні етапи побудови регресійних моделей.
9. Отримані результати підтверджують перспективність застосування методів машинного навчання та штучного інтелекту для моделювання властивостей сплавів із пам'яттю форми, що відкриває нові можливості для наукових досліджень і практичного використання.

Список використаних джерел

- [1] L. G. Machado and D. C. Lagoudas, *Shape Memory Alloys. Modeling of SMAs*. Springer, 2008. doi: 10.1007/978-0-387-47685-8.
- [2] P. Ghosh, A. Rao, and A. R. Srinivasa, “Design of multi-state and smart-bias components using shape memory alloy and shape memory polymer composites,” *Mater. Des.*, vol. 44, pp. 164–171, 2013, doi: 10.1016/j.matdes.2012.05.063.
- [3] L. A. Momoda, *Frontiers of Engineering*. National Academies Press, 2005. doi: 10.17226/11220.
- [4] J. N. Rao, Ashwin and Srinivasa, Arun Ramaswamy and Reddy, “Design of shape memory alloy (SMA) actuators,” 2015, doi: 10.1007/978-3-319-03188-0.
- [5] S. H. Mohammed and S. H. Shahatha, “Shape memory alloys, properties and applications: A review,” *AIP Conf. Proc.*, vol. 2593, May 2023, doi: 10.1063/5.0112999/17764437/020008_1_5.0112999.PDF.
- [6] K. Otsuka and X. Ren, “Recent developments in the research of shape memory alloys,” *Intermetallics*, vol. 7, no. 5, pp. 511–528, May 1999, doi: 10.1016/S0966-9795(98)00070-3.
- [7] R. Hmede, F. Chapelle, and Y. Lapusta, “Review of Neural Network Modeling of Shape Memory Alloys,” *Sensors*, vol. 22, no. 15, Aug. 2022, doi: 10.3390/S22155610.
- [8] J. Mohd Jani, M. Leary, A. Subic, and M. A. Gibson, “A review of shape memory alloy research, applications and opportunities,” *Mater. Des.*, vol. 56, pp. 1078–1113, Apr. 2014, doi: 10.1016/J.MATDES.2013.11.084.
- [9] W. Huang, “On the selection of shape memory alloys for actuators,” *Mater. Des.*, vol. 23, no. 1, pp. 11–19, Feb. 2002, doi: 10.1016/S0261-3069(01)00039-5.
- [10] A. Fink, Z. Fu, and C. Körner, “Functional properties and shape memory effect of Nitinol manufactured via electron beam powder bed fusion,” *Materialia*, vol. 30, p. 101823, Aug. 2023, doi: 10.1016/J.MTLA.2023.101823.

- [11] M. Elahinia, N. Shayesteh Moghaddam, M. Taheri Andani, A. Amerinatanzi, B. A. Bimber, and R. F. Hamilton, “Fabrication of NiTi through additive manufacturing: A review,” *Prog. Mater. Sci.*, vol. 83, pp. 630–663, Oct. 2016, doi: 10.1016/J.PMATSCI.2016.08.001.
- [12] G. Song, N. Ma, and H. N. Li, “Applications of shape memory alloys in civil structures,” *Eng. Struct.*, vol. 28, no. 9, pp. 1266–1274, Jul. 2006, doi: 10.1016/J.ENGSTRUCT.2005.12.010.
- [13] K. Otsuka, C. M. Wayman, K. Nakai, H. Sakamoto, and K. Shimizu, “Superelasticity effects and stress-induced martensitic transformations in Cu-Al-Ni alloys,” *Acta Metall.*, vol. 24, no. 3, pp. 207–226, Mar. 1976, doi: 10.1016/0001-6160(76)90071-7.
- [14] J. H. Yang and C. M. Wayman, “Self-accomodation and shape memory mechanism of ϵ -martensite — II. Theoretical considerations,” *Mater. Charact.*, vol. 28, no. 1, pp. 37–47, Jan. 1992, doi: 10.1016/1044-5803(92)90027-F.
- [15] L. Sun and W. M. Huang, “Nature of the multistage transformation in shape memory alloys upon heating,” *Met. Sci. Heat Treat.*, vol. 51, no. 11–12, pp. 573–578, Nov. 2009, doi: 10.1007/S11041-010-9213-X.
- [16] J. P. Oliveira, R. M. Miranda, and F. M. Braz Fernandes, “Welding and Joining of NiTi Shape Memory Alloys: A Review,” *Prog. Mater. Sci.*, vol. 88, pp. 412–466, Jul. 2017, doi: 10.1016/J.PMATSCI.2017.04.008.
- [17] T. W. Duerig and K. Bhattacharya, “The Influence of the R-Phase on the Superelastic Behavior of NiTi,” *Shape Mem. Superelasticity*, vol. 1, no. 2, pp. 153–161, Jun. 2015, doi: 10.1007/S40830-015-0013-4/FIGURES/13.
- [18] Mihálcz I., “FUNDAMENTAL CHARACTERISTICS AND DESIGN METHOD FOR NICKEL-TITANIUM SHAPE MEMORY ALLOY,” *Period. Polytech. Mech. Eng.*, vol. 45, no. 1, pp. 75–86, Feb. 2001, doi: n/a.
- [19] K. A. Tsoi, R. Stalmans, and J. Schrooten, “Transformational behaviour of constrained shape memory alloys,” *Acta Mater.*, vol. 50, no. 14, pp. 3535–3544, Aug. 2002, doi: 10.1016/S1359-6454(02)00145-3.

- [20] L. Miková, S. Medvecká-Beňová, M. Kelemen, F. Trebuňa, and I. Virgala, “APPLICATION OF SHAPE MEMORY ALLOY (SMA) AS ACTUATOR,” *METALURGIJA*, vol. 54, pp. 169–172, 2015.
- [21] M. S. Kim *et al.*, “Shape Memory Alloy (SMA) Actuators: The Role of Material, Form, and Scaling Effects,” *Adv. Mater.*, vol. 35, no. 33, p. 2208517, Aug. 2023, doi: 10.1002/ADMA.202208517.
- [22] X. P. Zhang, H. Y. Liu, B. Yuan, and Y. P. Zhang, “Superelasticity decay of porous NiTi shape memory alloys under cyclic strain-controlled fatigue conditions,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 481–482, no. 1-2 C, pp. 170–173, May 2008, doi: 10.1016/J.MSEA.2007.02.147.
- [23] L. Petrini and F. Migliavacca, “Biomedical Applications of Shape Memory Alloys,” *J. Metall.*, vol. 2011, pp. 1–15, May 2011, doi: 10.1155/2011/501483.
- [24] D. J. Hartl and D. C. Lagoudas, “Aerospace applications of shape memory alloys,” *Proc. Inst. Mech. Eng. Part G J. Aerosp. Eng.*, vol. 221, no. 4, pp. 535–552, 2007, doi: 10.1243/09544100JAERO211.
- [25] R. A. Abubakar, F. Wang, and L. Wang, “A review on Nitinol shape memory alloy heat engines,” *Smart Mater. Struct.*, vol. 30, no. 1, p. 013001, Nov. 2020, doi: 10.1088/1361-665X/ABC6B8.
- [26] S. Zareie, A. S. Issa, R. J. Seethaler, and A. Zabihollah, “Recent advances in the applications of shape memory alloys in civil infrastructures: A review,” *Structures*, vol. 27, pp. 1535–1550, Oct. 2020, doi: 10.1016/J.ISTRUC.2020.05.058.
- [27] T. W. Duerig, “Applications of Shape Memory,” *Mater. Sci. Forum*, vol. 56–58, pp. 679–691, Jan. 1990, doi: 10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/MSF.56-58.679.
- [28] H. Ma and C. Cho, “Feasibility study on a superelastic SMA damper with re-centring capability,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 473, no. 1–2, pp. 290–296, Jan. 2008, doi: 10.1016/J.MSEA.2007.04.073.
- [29] O. E. Onyshko, “Modeling of the Physicomechanical Behavior of Bodies Made of Alloys with Shape Memory in the Presence of Electric Fields,” *Mater. Sci.*, vol. 53,

- no. 4, pp. 541–547, Jan. 2018, doi: 10.1007/S11003-018-0107-1/METRICS.
- [30] P. Yasniy, M. Kolisnyk, O. Kononchuk, and V. Iasnii, “Calculation of constructive parameters of SMA damper,” *Sci. J. Ternopil Natl. Tech. Univ.*, vol. 88, no. 4, pp. 7–15, Jan. 2018, doi: 10.33108/VISNYK_TNTU2017.04.007.
- [31] J. Cederström and J. Van Humbeeck, “Relationship Between Shape Memory Material Properties and Applications,” *Le J. Phys. IV*, vol. 05, no. C2, pp. C2-335-C2-341, Feb. 1995, doi: 10.1051/JP4:1995251.
- [32] V. A. Chernenko, V. V. Kokorin, and I. N. Vitenko, “Properties of ribbon made from shape memory alloy Ni₂MnGa by quenching from the liquid state,” *Smart Mater. Struct.*, vol. 3, no. 1, p. 80, Mar. 1994, doi: 10.1088/0964-1726/3/1/010.
- [33] R. Ramprasad, R. Batra, G. Pilia, A. Mannodi-Kanakkithodi, and C. Kim, “Machine learning in materials informatics: recent applications and prospects,” *npj Comput. Mater.* 2017 31, vol. 3, no. 1, pp. 54–, Dec. 2017, doi: 10.1038/s41524-017-0056-5.
- [34] F. E. Bock, R. C. Aydin, C. J. Cyron, N. Huber, S. R. Kalidindi, and B. Klusemann, “A review of the application of machine learning and data mining approaches in continuum materials mechanics,” *Front. Mater.*, vol. 6, p. Article No. 110, May 2019, doi: 10.15480/882.2309.
- [35] G. M. Seed and G. S. Murphy, “The applicability of neural networks in modelling the growth of short fatigue cracks,” *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.*, vol. 21, no. 2, pp. 183–190, 1998, doi: 10.1046/J.1460-2695.1998.00329.X.
- [36] P. Artymiak, L. Bukowski, J. Feliks, S. Narberhaus, and H. Zenner, “Determination of S–N curves with the application of artificial neural networks,” *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.*, vol. 22, no. 8, pp. 723–728, Aug. 1999, doi: 10.1046/J.1460-2695.1999.T01-1-00198.X.
- [37] J. Y. Kang and J. H. Song, “Neural network applications in determining the fatigue crack opening load,” *Int. J. Fatigue*, vol. 20, no. 1, pp. 57–69, Jan. 1998, doi: 10.1016/S0142-1123(97)00119-9.

- [38] J. C. Figueira Pujol and J. M. Andrade Pinto, “A neural network approach to fatigue life prediction,” *Int. J. Fatigue*, vol. 33, no. 3, pp. 313–322, Mar. 2011, doi: 10.1016/J.IJFATIGUE.2010.09.003.
- [39] Y. Kim, H. Kim, and I. G. Ahn, “A study on the fatigue damage model for Gaussian wideband process of two peaks by an artificial neural network,” *Ocean Eng.*, vol. 111, pp. 310–322, Jan. 2016, doi: 10.1016/J.OCEANENG.2015.11.008.
- [40] A. Rovinelli, M. D. Sangid, H. Proudhon, and W. Ludwig, “Using machine learning and a data-driven approach to identify the small fatigue crack driving force in polycrystalline materials,” *npj Comput. Mater.* 2018 41, vol. 4, no. 1, pp. 35–, Jul. 2018, doi: 10.1038/s41524-018-0094-7.
- [41] H. Wang, W. Zhang, F. Sun, and W. Zhang, “A Comparison Study of Machine Learning Based Algorithms for Fatigue Crack Growth Calculation,” *Mater.* 2017, Vol. 10, vol. 10, no. 5, May 2017, doi: 10.3390/MA10050543.
- [42] M. Jimenez-Martinez and M. Alfaro-Ponce, “Fatigue damage effect approach by artificial neural network,” *Int. J. Fatigue*, vol. 124, pp. 42–47, Jul. 2019, doi: 10.1016/J.IJFATIGUE.2019.02.043.
- [43] J. F. Durodola, N. Li, S. Ramachandra, and A. N. Thite, “A pattern recognition artificial neural network method for random fatigue loading life prediction,” *Int. J. Fatigue*, vol. 99, pp. 55–67, Jun. 2017, doi: 10.1016/J.IJFATIGUE.2017.02.003.
- [44] D. Xue *et al.*, “An informatics approach to transformation temperatures of NiTi-based shape memory alloys,” *Acta Mater.*, vol. 125, pp. 532–541, Feb. 2017, doi: 10.1016/J.ACTAMAT.2016.12.009.
- [45] S. Wu, S. Zhao, D. Wu, and Y. Wang, “Constitutive modelling for restrained recovery of shape memory alloys based on artificial neural network,” *NeuroQuantology*, vol. 16, no. 5, pp. 806–813, 2018, doi: 10.14704/NQ.2018.16.5.1387.
- [46] O. YASNIY and V. DEMCHYK, “СПЛАВИ З ПАМ’ЯТТЮ ФОРМИ І МАШИННЕ НАВЧАННЯ: ОГЛЯД,” *Meas. Comput. DEVICES Technol. Process.*,

- no. 2, pp. 13–17, May 2025, doi: 10.31891/2219-9365-2025-82-2.
- [47] X. Liu, P. Xu, J. Zhao, W. Lu, M. Li, and G. Wang, “Material machine learning for alloys: Applications, challenges and perspectives,” *J. Alloys Compd.*, vol. 921, p. 165984, Nov. 2022, doi: 10.1016/J.JALLCOM.2022.165984.
- [48] Z. Song *et al.*, “Machine learning in materials design: Algorithm and application*,” *Chinese Phys. B*, vol. 29, no. 11, p. 116103, Nov. 2020, doi: 10.1088/1674-1056/ABC0E3.
- [49] T. M. . Mitchell, *Machine learning*, Indian Edition. McGraw Hill, 2017.
- [50] Q. Hu, K. Chen, F. Liu, M. Zhao, F. Liang, and D. Xue, “Smart Materials Prediction: Applying Machine Learning to Lithium Solid-State Electrolyte,” *Materials (Basel)*, vol. 15, no. 3, p. 1157, Feb. 2022, doi: 10.3390/MA15031157.
- [51] G. M. Coli, E. Boattini, L. Filion, and M. Dijkstra, “Inverse design of soft materials via a deep learning-based evolutionary strategy,” *Sci. Adv.*, vol. 8, no. 3, Jan. 2022, doi: 10.1126/SCIADV.ABJ6731/SUPPL_FILE/SCIADV.ABJ6731_SM.PDF.
- [52] J. Li *et al.*, “AI Applications through the Whole Life Cycle of Material Discovery,” *Matter*, vol. 3, no. 2, pp. 393–432, Aug. 2020, doi: 10.1016/J.MATT.2020.06.011.
- [53] W. Trehern, R. Ortiz-Ayala, K. C. Atli, R. Arroyave, and I. Karaman, “Data-driven shape memory alloy discovery using Artificial Intelligence Materials Selection (AIMS) framework,” *Acta Mater.*, vol. 228, p. 117751, Apr. 2022, doi: 10.1016/J.ACTAMAT.2022.117751.
- [54] U. M. H. U. Kankanamge, J. Reiner, X. Ma, S. C. Gallo, and W. Xu, “Machine learning guided alloy design of high-temperature NiTiHf shape memory alloys,” *J. Mater. Sci.*, vol. 57, no. 41, pp. 19447–19465, Nov. 2022, doi: 10.1007/S10853-022-07793-6.
- [55] N. Lenzen and O. Altay, “Machine Learning Enhanced Dynamic Response Modelling of Superelastic Shape Memory Alloy Wires,” *Mater. 2022, Vol. 15*, vol. 15, no. 1, Jan. 2022, doi: 10.3390/MA15010304.
- [56] R. Dutta, C. Chen, D. Renshaw, and D. Liang, “Vision Based Supervised Restricted

- Boltzmann Machine Helps to Actuate Novel Shape Memory Alloy Accurately,” Jun. 2021, doi: 10.21203/RS.3.RS-577116/V1.
- [57] W. J. Song, S. G. Choi, and E. S. Lee, “Prediction and comparison of electrochemical machining on shape memory alloy(SMA) using deep neural network(DNN),” *J. Electrochem. Sci. Technol.*, vol. 10, no. 3, pp. 276–283, Sep. 2019, doi: 10.33961/JECST.2019.03174.
- [58] M. Liu, L. Hao, W. Zhang, Y. Chen, and J. Chen, “Reinforcement Learning Control of a Shape Memory Alloy-based Bionic Robotic Hand,” *9th IEEE Int. Conf. Cyber Technol. Autom. Control Intell. Syst. CYBER 2019*, pp. 969–973, Jul. 2019, doi: 10.1109/CYBER46603.2019.9066775.
- [59] A. K. Sheshadri *et al.*, “AI models for prediction of displacement and temperature in shape memory alloy (SMA) wire,” *AIP Conf. Proc.*, vol. 2335, Mar. 2021, doi: 10.1063/5.0043926.
- [60] R. Dutta, L. Chen, D. Renshaw, and D. Liang, “Artificial intelligence automates the characterization of reversibly actuating planar-flow-casted NiTi shape memory alloy foil,” *PLoS One*, vol. 17, no. 10 October, Oct. 2022, doi: 10.1371/JOURNAL.PONE.0275485.
- [61] A. Mendizabal, P. Márquez-Neila, and S. Cotin, “Simulation of hyperelastic materials in real-time using deep learning,” *Med. Image Anal.*, vol. 59, p. 101569, Jan. 2020, doi: 10.1016/J.MEDIA.2019.101569.
- [62] M. R. Prajna, P. J. Antony, and N. A. Jnanesh, “Machine learning approach for flexural characterization of smart material,” *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 1142, no. 1, Nov. 2018, doi: 10.1088/1742-6596/1142/1/012007.
- [63] K. Levenberg, “A method for the solution of certain non-linear problems in least squares,” *Q. Appl. Math.*, vol. 2, no. 2, pp. 164–168, Jul. 1944, doi: 10.1090/QAM/10666.
- [64] D. W. Marquardt, “An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters,” *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, vol. 11, no. 2, pp. 431–441, Jun. 1963, doi:

10.1137/0111030.

- [65] Volodymyr Iasnii; Nazarii Bykiv; Oleh Yasniy; Volodymyr Budz, “Methodology and some results of studying the influence of frequency on functional properties of pseudoelastic SMA | Enhanced Reader,” *Sci. J. Ternopil Natl. Tech. Univ.*, vol. No 3, no. 107, pp. 45–50, 2022.
- [66] O. Yasniy, I. Didych, and Y. Lapusta, “Prediction of fatigue crack growth diagrams by methods of machine learning under constant amplitude loading,” *Acta Metall. Slovaca*, vol. 26, no. 1, pp. 31–33, 2020, doi: 10.36547/AMS.26.1.346.
- [67] P. Yasniy, O. Pastukh, Y. Pyndus, N. S. Lutsyk, and I. S. Didych, “Prediction of the Diagrams of Fatigue Fracture of D16T Aluminum Alloy by the Methods of Machine Learning,” *Mater. Sci.*, vol. 54, no. 3, pp. 333–338, Nov. 2018, doi: 10.1007/S11003-018-0189-9.
- [68] J. R. Mohanty, B. B. Verma, D. R. K. Parhi, and P. K. Ray, “Application of Artificial Neural Network for Predicting Fatigue Crack Propagation Life of Aluminum Alloys,” 2009, Accessed: Mar. 03, 2026. [Online]. Available: <http://dspace.nitrkl.ac.in:8080/dspace/handle/2080/1024>
- [69] R. M. V. Pidaparti and M. J. Palakal, “Neural network approach to fatigue-crack-growth predictions under aircraft spectrum loadings,” <https://doi.org/10.2514/3.46797>, vol. 32, no. 4, pp. 825–831, May 1995, doi: 10.2514/3.46797.
- [70] K. Zarrabi, W. W. Lu, and A. K. Hellier, “An artificial neural network approach to fatigue crack growth,” *Adv. Mater. Res.*, vol. 275, pp. 3–6, 2011, doi: 10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/AMR.275.3.
- [71] S. Liu, Y., Mahadevan, “An Artificial Neural Network-Based Algorithm for Evaluation of Fatigue Crack Growth,” *Int. J. Fatigue*, vol. 27, pp. 790–795, 2005.
- [72] Y. Murakami, H., Okazaki, “Bayesian Neural Network Analysis of Fatigue Crack Growth Rate in Nickel-Base Superalloys,” *ISIJ Int.*, vol. 36, pp. 1373–1378, 1996.
- [73] Y. Zhang, S., Chen, X., Liu, “Prediction of Fatigue–Crack Growth with Neural

- Network-Based Increment Learning Scheme,” *Eng. Fract. Mech.*, vol. 250, no. 107744, 2021.
- [74] R. Pratoori, “Comparison of Random Forest and Neural Network Framework for Prediction of Fatigue Crack Growth Rate in Nickel Superalloys,” 2023.
- [75] A. MOUSSOUNI, N. BENACHOUR, and M. BENACHOUR, “Modeling of fatigue crack growth by neural networks,” *Int. Conf. Sci. Acad. Res.*, vol. 1, pp. 215–219, Mar. 2023, Accessed: Mar. 03, 2026. [Online]. Available: <https://as-proceeding.com/index.php/icsar/article/view/298>
- [76] F. M. Monticeli, R. M. Neves, H. L. Ornaghi, and J. H. S. Almeida, “Prediction of Bending Properties for 3D-Printed Carbon Fibre/Epoxy Composites with Several Processing Parameters Using ANN and Statistical Methods,” *Polymers (Basel)*, vol. 14, no. 17, Sep. 2022, doi: 10.3390/POLYM14173668.
- [77] O. Yasniy, M. Mytnyk, P. Maruschak, A. Mykytyshyn, and I. Didych, “MACHINE LEARNING METHODS AS APPLIED TO MODELLING THERMAL CONDUCTIVITY OF EPOXY-BASED COMPOSITES WITH DIFFERENT FILLERS FOR AIRCRAFT,” *Aviation*, vol. 28, no. 2, pp. 64–71, May 2024, doi: 10.3846/AVIATION.2024.21472.
- [78] I. Konovalenko, P. Maruschak, J. Brezinová, J. Viňáš, and J. Brezina, “Steel surface defect classification using deep residual neural network,” *Metals (Basel)*, vol. 10, no. 6, pp. 1–15, Jun. 2020, doi: 10.3390/MET10060846.
- [79] D. Tymoshchuk, O. Yasniy, P. Maruschak, V. Iasnii, and I. Didych, “Loading Frequency Classification in Shape Memory Alloys: A Machine Learning Approach,” *Comput. 2024, Vol. 13*, vol. 13, no. 12, Dec. 2024, doi: 10.3390/COMPUTERS13120339.
- [80] O. Yasniy, I. Pasternak, I. Didych, S. Fedak, and D. Tymoshchuk, “Methods of jump-like creep modeling of AMg6 aluminum alloy,” *Procedia Struct. Integr.*, vol. 48, pp. 149–154, 2023, doi: 10.1016/J.PROSTR.2023.07.141.
- [81] “Orange Data Mining.” Accessed: Mar. 09, 2026. [Online]. Available:

<https://orangedatamining.com/>

- [82] С. В. Пронін and А. Д. Сотников, “ВИКОРИСТАННЯ ПЛАТФОРМИ ORANGE ДЛЯ АНАЛІЗУ ДАНИХ,” *Вісник Харківського національного автомобільно-дорожнього університету*, no. 99, pp. 131–131, Dec. 2022, doi: 10.30977/BUL.2219-5548.2022.99.0.131.
- [83] M. Yu.A., S. T.V., and G. A.I., “Using orange technology for data mining in the education sector,” *Системні технології*, vol. 3, no. 152, pp. 115–127, Apr. 2024, doi: 10.34185/1562-9945-3-152-2024-12.
- [84] G. Birkhoff and C. de Boor, “Piecewise Polynomial Interpolation and Approximation,” *Approx. Funct. Elsevier Publ. Company, Amsterdam*, pp. 164–190, 1964, Accessed: Mar. 03, 2026. [Online]. Available: <https://www.scirp.org/reference/referencespapers?referenceid=171297>
- [85] H. Akima, “A New Method of Interpolation and Smooth Curve Fitting Based on Local Procedures,” *J. ACM*, vol. 17, no. 4, pp. 589–602, Oct. 1970, doi: 10.1145/321607.321609.
- [86] C. C. C. Moler, “Makima Piecewise Cubic Interpolation,” *Mathematics and Computing - MATLAB & Simulink*. Accessed: Mar. 03, 2026. [Online]. Available: <https://blogs.mathworks.com/cleve/2019/04/29/makima-piecewise-cubic-interpolation/>
- [87] J. Liu, J. Chen, Z. Sun, H. Zhang, and Q. Yuan, “A Study on Fatigue Crack Closure Associated with the Growth of Long Crack in a New Titanium Alloy,” *Metals (Basel)*, vol. 13, no. 8, Aug. 2023, doi: 10.3390/MET13081377.
- [88] G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Taylor, “An Introduction to Statistical Learning,” 2023, doi: 10.1007/978-3-031-38747-0.
- [89] “Applications of Machine Learning - GeeksforGeeks.” Accessed: Mar. 01, 2026. [Online]. Available: <https://www.geeksforgeeks.org/machine-learning/machine-learning-introduction/>
- [90] P. Srisuradetchai and K. Suksrikan, “Random kernel k-nearest neighbors

- regression,” *Front. Big Data*, vol. 7, 2024, doi: 10.3389/FDATA.2024.1402384.
- [91] E. Fix and J. L. Hodges, “Discriminatory Analysis. Nonparametric Discrimination: Consistency Properties,” *Int. Stat. Rev. / Rev. Int. Stat.*, vol. 57, no. 3, p. 238, Dec. 1989, doi: 10.2307/1403797.
- [92] A. Smola and S. V. N. Vishwanathan, *Introduction to Machine Learning*. Cambridge University Press, 2010.
- [93] R. Basak, D., Pal, S., Ch, D., & Patranabis, “Support Vector Regression.,” *Neural Inf. Process. Rev.*, vol. 11, pp. 203–224, 2007, Accessed: Mar. 03, 2026. [Online]. Available: <https://www.scirp.org/reference/referencespapers?referenceid=2911991>
- [94] E. García-Gonzalo, Z. Fernández-Muñiz, P. J. G. Nieto, A. B. Sánchez, and M. M. Fernández, “Hard-Rock Stability Analysis for Span Design in Entry-Type Excavations with Learning Classifiers,” *Mater. 2016, Vol. 9*, vol. 9, no. 7, Jun. 2016, doi: 10.3390/MA9070531.
- [95] T. M. Mitchell, *Machine learning*. London: McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1997.
- [96] “www.statsoft.com Electronic Manual.”
- [97] T. K. Ho, “Random decision forests,” *Proc. Int. Conf. Doc. Anal. Recognition, ICDAR*, vol. 1, pp. 278–282, 1995, doi: 10.1109/ICDAR.1995.598994.
- [98] E. M. Kleinberg, “Stochastic discrimination,” *Ann. Math. Artif. Intell.*, vol. 1, no. 1–4, pp. 207–239, Sep. 1990, doi: 10.1007/BF01531079/METRICS.
- [99] L. Breiman, “Random forests,” *Mach. Learn.*, vol. 45, no. 1, pp. 5–32, Oct. 2001, doi: 10.1023/A:1010933404324/METRICS.
- [100] Y. Amit and D. Geman, “Communicated by Shimon Ullman Shape Quantization and Recognition with Randomized Trees,” *Neural Comput.*, vol. 9, pp. 1545–1588, 1997.
- [101] G. Biau and G. B. Fr, “Analysis of a Random Forests Model,” *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 13, pp. 1063–1095, 2012.
- [102] M. Y. Khan, A. Qayoom, M. S. Nizami, M. S. Siddiqui, S. Wasi, and S. M. K. U. R. Raazi, “Automated Prediction of Good Dictionary EXamples (GDEX): A

- Comprehensive Experiment with Distant Supervision, Machine Learning, and Word Embedding-Based Deep Learning Techniques,” *Complexity*, vol. 2021, no. 1, p. 2553199, Jan. 2021, doi: 10.1155/2021/2553199.
- [103] N. B. Shakhovska, R. M. Kaminsky, and O. B. Vovk, *Artificial intelligence systems: textbook. manual*. Lviv: Lviv Polytechnic Publishing House, 2018.
- [104] C. Aldrich, “Process Variable Importance Analysis by Use of Random Forests in a Shapley Regression Framework,” *Minerals*, vol. 10, pp. 2–17, 2020, doi: doi:10.3390/min10050420.
- [105] W. Cao *et al.*, “A Learning Framework for Intelligent Selection of Software Verification Algorithms,” *J. Artif. Intell.*, vol. 2, no. 4, pp. 177–187, 2020, doi: 10.32604/JAI.2020.014829.
- [106] J. H. Friedman, “Greedy function approximation: A gradient boosting machine,” *Ann. Stat.*, vol. 29, no. 5, pp. 1189–1232, 2001, doi: 10.1214/AOS/1013203451.
- [107] J. H. Friedman, “Stochastic gradient boosting,” *Comput. Stat. Data Anal.*, vol. 38, no. 4, pp. 367–378, Feb. 2002, doi: 10.1016/S0167-9473(01)00065-2.
- [108] A. Natekin and A. Knoll, “Gradient boosting machines, a tutorial,” *Front. Neurorobot.*, vol. 7, no. DEC, 2013, doi: 10.3389/FNBOT.2013.00021.
- [109] Z. He, D. Lin, T. Lau, and M. Wu, “Gradient boosting machine: a survey point zero one technology,” *arXiv*, vol. 1908.06951, pp. 1–9, 2019.
- [110] Y. Freund and R. E. Schapire, “A Decision-Theoretic Generalization of On-Line Learning and an Application to Boosting,” *J. Comput. Syst. Sci.*, vol. 55, no. 1, pp. 119–139, Aug. 1997, doi: 10.1006/JCSS.1997.1504.
- [111] M. Chen, U. Challita, W. Saad, C. Yin, and M. Debbah, “Artificial Neural Networks-Based Machine Learning for Wireless Networks: A Tutorial,” *IEEE Commun. Surv. Tutorials*, vol. 21, no. 4, pp. 3039–3071, Oct. 2019, doi: 10.1109/COMST.2019.2926625.
- [112] M. van Gerven and S. Bohte, “Editorial: Artificial neural networks as models of neural information processing,” *Front. Comput. Neurosci.*, vol. 11, p. 333898, Dec.

- 2017, doi: 10.3389/FNCOM.2017.00114/TEXT.
- [113] F. Bre, J. M. Gimenez, and V. D. Fachinotti, “Prediction of wind pressure coefficients on building surfaces using artificial neural networks,” *Energy Build.*, vol. 158, pp. 1429–1441, Jan. 2018, doi: 10.1016/J.ENBUILD.2017.11.045.
- [114] H. N. Balakrishnan, A. Kathpalia, S. Saha, and N. Nagaraj, “ChaosNet: A chaos based artificial neural network architecture for classification,” *Chaos*, vol. 29, no. 11, Nov. 2019, doi: 10.1063/1.5120831.
- [115] J. Schmidhuber, “Deep learning in neural networks: An overview,” *Neural Networks*, vol. 61, pp. 85–117, Jan. 2015, doi: 10.1016/J.NEUNET.2014.09.003.
- [116] R. Dastres and M. Soori, “Artificial Neural Network Systems,” *Int. J. Imaging Robot.*, vol. 2021, no. 2, pp. 13–25, 2021, Accessed: Mar. 09, 2026. [Online]. Available: www.ceserp.com/cp-jour
- [117] Y. chen Wu and J. wen Feng, “Development and Application of Artificial Neural Network,” *Wirel. Pers. Commun.*, vol. 102, no. 2, pp. 1645–1656, Sep. 2018, doi: 10.1007/S11277-017-5224-X/METRICS.
- [118] S. Haykin, *Neural Networks and Learning Machines. Third Edition*, Pearson Education, Inc. McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada, 2009.
- [119] V. Iasnii, P. Yasniy, Y. Lapusta, and T. Shnitsar, “Experimental study of pseudoelastic NiTi alloy under cyclic loading,” *Sci. J. Ternopil Natl. Tech. Univ.*, vol. 92, no. 4, pp. 7–12, 2019, doi: 10.33108/VISNYK_TNTU2018.04.007.
- [120] O. Yasniy, V. Demchyk, and N. Lutsyk, “Modelling of functional properties of shape-memory alloys by machine learning methods,” *Sci. J. Ternopil Natl. Tech. Univ.*, vol. 108, no. 4, pp. 74–78, 2022, doi: 10.33108/VISNYK_TNTU2022.04.074.
- [121] V. Demchyk and O. Yasniy, “Modelling of functional properties of shape memory alloy by machine learning methods,” *Sci. J. Ternopil Natl. Tech. Univ.*, vol. 119, no. 3, pp. 56–62, 2025, doi: 10.33108/VISNYK_TNTU2025.03.056.
- [122] O. Yasniy, N. Lutsyk, V. Demchyk, H. Osukhivska, and O. Malyshevskya, “The prediction of structural properties of Ni-Ti shape memory alloy by the supervised

machine learning methods”.

- [123] O. Yasniy, I. Didych, D. Tymoshchuk, P. Maruschak, and V. Demchyk, “Prediction of structural elements lifetime of titanium alloy using neural network,” *Procedia Struct. Integr.*, vol. 72, pp. 181–187, Jan. 2025, doi: 10.1016/J.PROSTR.2025.08.090.
- [124] J. Chen and Y. Liu, “Fatigue modeling using neural networks: A comprehensive review,” *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.*, vol. 45, no. 4, pp. 945–979, Apr. 2022, doi: 10.1111/FFE.13640.
- [125] C. G. Broyden, “The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms 1. General Considerations,” *IMA J. Appl. Math.*, vol. 6, no. 1, pp. 76–90, Mar. 1970, doi: 10.1093/IMAMAT/6.1.76.
- [126] FLETCHER R, “A new approach to variable metric algorithms,” *Comput. J.*, vol. 13, no. 3, pp. 317–322, Jan. 1970, doi: 10.1093/COMJNL/13.3.317.
- [127] D. Goldfarb, “A Family of Variable-Metric Methods Derived by Variational Means,” *Math. Comput.*, vol. 24, no. 109, p. 23, Jan. 1970, doi: 10.2307/2004873.
- [128] D. F. Shanno, “Conditioning of Quasi-Newton Methods for Function Minimization,” *Math. Comput.*, vol. 24, no. 111, p. 647, Jul. 1970, doi: 10.2307/2004840.
- [129] О. П. Ясній *et al.*, “Моделі гістерезисної поведінки матеріалів із пам’яттю форми,” *Праці конференції Міжнародної науково-технічної конференції присвяченої 70-річчю від дня народження член-кореспондента НАН України, проф. Ясній Петра Володимировича „Міцність і довговічність сучасних матеріалів та конструкцій“*, pp. 148–150, Nov. 2022, Accessed: Mar. 10, 2026. [Online]. Available: <http://elartu.tntu.edu.ua/handle/lib/39133>
- [130] V. Hutsaylyuk, V. Demchyk, O. Yasniy, N. Lutsyk, and A. Fialka, “The modelling of NiTi shape memory alloy functional properties by machine learning methods,” *Appl. Comput. Sci.*, vol. 21, no. 4, pp. 127–135, Dec. 2025, doi: 10.35784/ACS_7986.
- [131] W. S. Cleveland, “Robust Locally Weighted Regression and Smoothing

Scatterplots," *J. Am. Stat. Assoc.*, vol. 74, pp. 829–836, 1979.

Додатки

Додаток А

Список публікацій здобувача та відомості про апробацію результатів дисертації

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Публікації у фахових виданнях України:

1. Yasniy O.¹, Demchyk V.², Lutsyk N.³. Modelling of functional properties of shape-memory alloys by machine learning methods. Scientific Journal of the Ternopil National Technical University, Vol. 108, 2022, P. 74-78. https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2022.04.074 (1 – планував і керував дослідженням, 2 – розробив систему моделювання функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми методами машинного навчання, 3 – брав участь в обговоренні результатів та оформленні публікації).
2. Ясній О.¹, Демчик В.². Сплави з пам'яттю форми і машинне навчання: огляд. Measuring and computing devices in technological processes, Vol. 82, 2025, P. 13-17. <https://doi.org/10.31891/2219-9365-2025-82-2> (1 – планував дослідження та брав участь у написанні статті, 2 – здійснив огляд, брав участь у написанні та оформленні статті).
3. Demchyk V., Yasniy O. (2025) Modelling of functional properties of shape memory alloy by machine learning methods. Scientific Journal of the Ternopil National Technical University, Vol. 119, No. 3, P. 56-62. https://doi.org/10.33108/visnyk_tntu2025.03.056 (1 – розробив систему моделювання функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми методами машинного навчання, 2 – планував і керував дослідженням).

Публікації у виданнях, які індексуються у міжнародній наукометричній базі Scopus:

1. Yasniy O.¹, Didych I.², Tymoshchuk D.³, Maruschak P.⁴, **Demchyk V.⁵**. Prediction of structural elements lifetime of titanium alloy using neural network. *Procedia Structural Integrity*, Vol. 72, 2025, P. 181-187. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2025.08.090> (¹ – планував і керував дослідженням, ⁵ – розробив систему моделювання втомної довговічності титанового сплаву на основі нейронної мережі, ^{2, 3, 4} – брали участь в обговоренні результатів та оформленні публікації)
2. Hutsaylyuk V.¹, **Demchyk V.²**, Yasniy O.³, Lutsyk N.⁴, Fiialka A.⁵. The modelling of NiTi shape memory alloy functional properties by machine learning methods, *Applied Computer Science*, Vol. 21, No. 4, 2025, P. 127-135. https://doi.org/10.35784/acs_7986 (³ – планував і керував дослідженням, ² – розробив систему моделювання функціональних властивостей сплаву з пам'яттю форми на основі нітинолу методами машинного навчання, ^{1, 4, 5} – брали участь в обговоренні результатів та оформленні публікації)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Моделі гістерезисної поведінки матеріалів із пам'яттю форми / Ясній О., Ясній В., Сулим Г., Пастернак Я., **Демчик В.** // Матеріали Міжнародної науково-технічної конференції „Міцність і довговічність сучасних матеріалів та конструкцій“, 10-11 листопада 2022 року. — Т. : ФОП Паляниця В. А., 2022. — С. 148–150. — (Нові та сучасні матеріали та технології). форма участі – очна, усна доповідь.
2. Yasniy O., Lutsyk N., **Demchyk V.**, Osukhivska H., Malyshevska O. The prediction of structural properties of Ni-Ti shape memory alloy by the supervised machine learning methods, 3rd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems, November 22–24, 2023, Ternopil, Ukraine, Opole, Poland. форма участі – дистанційна, усна доповідь.

Акт впровадження



ТОВ "Реворк-Спейс"
вул. Бережанська 10, офіс 82
м.Тернопіль, 46027, Україна
+38 068 699 3913
legal@rework-space.com

Акт впровадження

Результати дисертаційної роботи Демчика Владислава Івановича на тему «Методи машинного навчання для моделювання функціональних властивостей та довговічності сплавів», яка виконана в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя, в частині побудови моделей машинного навчання успішно застосовуються в дослідницьких проектах ТОВ «Реворк-Спейс».

Директор



Бревус Г.Б.

Додаток В



Акт впровадження

1. *Об'єкт впровадження:* результати дисертаційної роботи.
2. *Ким запропоновано, виконавці, адреса:* Демчик В.І. аспірант кафедри штучного інтелекту та аналізу даних Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, кафедра штучного інтелекту та аналізу даних, м. Тернопіль, вул. Руська 56.
3. *Джерело інформації:* Дисертаційна робота на здобуття наукового ступеня доктора філософії Демчика В.І. на тему: "Методи машинного навчання для моделювання функціональних властивостей та довговічності сплавів".
4. *Де впроваджено:* Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, м. Тернопіль, вул. Руська 56, кафедра будівельної механіки.
5. *Термін впровадження:* 2026 р.
6. *Висновок по впровадженню:* Результати дисертаційної роботи використані для вдосконалення навчальних курсів за спеціальністю G19 "Будівництво та цивільна інженерія" з предмету "Сучасні матеріали в будівництві" для магістрів. Результати дозволяють оновити інформацію щодо застосування методів машинного навчання до прогнозування функціональних властивостей сплавів з пам'яттю форми під дією циклічного навантаження.

Проректор з
наукової роботи

Павло МАРУЩАК

Декан ФМТ

Роман ЛЕЩУК