

МЕТОДИ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ВЛАСТИВОСТЕЙ НОВІТНІХ МАТЕРІАЛІВ

Пастернак Ярослав Михайлович

Волинський національний університет імені Лесі Українки, iaroslav.pasternak@vnu.edu.ua

Хоменко Віталій Юрійович

Волинський національний університет імені Лесі Українки, khomenko.vitalii@vnu.edu.ua

Сучасна наука про матеріали стикається зі складними завданнями, пов'язаними з пошуком, проектуванням та оптимізацією нових матеріалів. Традиційні методи дослідження часто вимагають значних часових та фінансових витрат, тому все більшого значення набувають методи машинного навчання. Вони дозволяють аналізувати великі обсяги даних, виявляти закономірності та прогнозувати властивості матеріалів, що значно прискорює процес їх розробки.

Машинне навчання знайшло широке застосування в моделюванні властивостей новітніх матеріалів [1]. Наприклад, методи регресії використовуються для передбачення числових характеристик, таких як міцність, електропровідність або теплопровідність. Класифікаційні алгоритми допомагають визначати, до якого класу належить матеріал на основі його властивостей. Нейронні мережі, зокрема згорткові, ефективно аналізують складні структури матеріалів, такі як зображення мікроструктур або атомні конфігурації. Крім того, методи кластеризації дозволяють групувати матеріали за схожими характеристиками, що спрощує пошук аналогів або нових комбінацій. Важливим напрямком є використання машинного навчання для оптимізації складів матеріалів, що дозволяє досягати бажаних властивостей при мінімальних витратах. Також алгоритми на основі дерев рішень або ансамблів моделей забезпечують інтерпретацію результатів, що є ключовим для розуміння процесів, які відбуваються в матеріалах.

Перспективи застосування методів машинного навчання в моделюванні властивостей матеріалів є надзвичайно широкими. Одним із найперспективніших напрямків є розробка матеріалів для відновлюваної енергетики, таких як ефективні сонячні панелі або акумулятори з високою ємністю. Машинне навчання може допомогти оптимізувати склади електролітів або електродів для літій-іонних акумуляторів, що значно підвищить їх ефективність. У галузі медицини методи машинного навчання можуть бути використані для створення біосумісних матеріалів, які імітують властивості людських тканин. Це відкриває нові можливості для розробки імплантатів або протезів. У аерокосмічній промисловості машинне навчання може допомогти у створенні легких і міцних композитних матеріалів, які зменшать вагу літаків і ракет, зберігаючи їхню міцність. Також перспективним є застосування цих методів для моделювання матеріалів, стійких до екстремальних умов, таких як високі температури або тиск. Крім того, методи машинного навчання можуть бути використані для прогнозування термінів експлуатації матеріалів, що дозволить уникнути раптових поломок і зменшити витрати на обслуговування. У хімічній промисловості вони можуть допомогти у створенні каталізаторів з високою активністю, що підвищить ефективність виробничих процесів. Машинне навчання також може бути використане для моделювання матеріалів із заданими оптичними властивостями, що важливо для розробки нових типів лазерів або оптичних пристроїв.

Отже, методи машинного навчання стали незамінним інструментом у дослідженні новітніх матеріалів. Вони не лише прискорюють процес розробки, але й відкривають нові можливості для відкриття матеріалів із унікальними властивостями.

Список літератури

1. Yasniy O., Pasternak Ia., Didych I., Fedak S., Tymoshchuk D. Methods of jump-like creep modeling of AMg6 aluminum alloy. *Procedia Structural Integrity*. 2023. 48. P. 149–154. <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2023.07.141>