

УДК 669.295, 004.89

DOI: 10.15587/1729-4061.2018.134319

Розроблення методу машинного навчання для ідентифікації властивостей порошків титанових сплавів у адитивних технологіях

Р. О. Ткаченко, З. А. Дурягіна, І. А. Лемішка, І. В. Ізонін, А. М. Тростянчин

На основі експериментально встановлених даних щодо параметрів мікроструктури, елементного та фракційного складу порошків титанових сплавів виділено чотири класи їх відповідності як вихідної сировини для адитивних технологій – матеріал з відмінними властивостями, оптимальними властивостями, в матеріалі можливі дефекти і бракований матеріал. Встановлено основні характеристики матеріалу, які визначають його приналежність до певного класу. Для реалізації процедур машинного навчання побудовано навчальну та тестову вибірки на основі 20 ознак, які характеризують кожен з чотирьох класів порошків титанових сплавів. Описано розроблений метод ідентифікації класу матеріалу, який базується на сумісному використанні поліному Колмогорова-Габора другого степеня та алгоритмі Випадкового лісу. На основі точності роботи в режимах навчання та застосування проведено експериментальне порівняння результатів роботи розробленого методу з результатами роботи існуючих методів: Випадкового лісу, Логістичної регресії та Машини опорних векторів. Наведено візуалізацію результатів роботи усіх досліджених методів.

Розроблений метод керованого навчання дозволяє будувати моделі опрацювання великої кількості ознак кожного вхідного вектора. При цьому алгоритмом Випадкового лісу забезпечуються задовільні генералізуючі властивості при збереженні переваг додаткового підвищення точності на основі полінома Колмогорова-Габора.

Експериментально встановлено основні переваги розробленого методу, зокрема щодо додаткового підвищення точності розв'язання задачі класифікації. Розроблений метод дозволяє підвищити точність моделювання на 34,38; 33,34 та 3,13 % порівняно з методами: Машина опорних векторів, Логістична регресія та Випадковий ліс відповідно.

Отримані результати дозволяють значно скоротити фінансові та часові витрати під час виготовлення виробів методами адитивних технологій. Застосування інструментарію штучного інтелекту дозволяє зменшити трудомісткість та енерговитратність експериментів з визначення оптимальних характеристик порошкових матеріалів

Ключові слова: порошки титанових сплавів, мікроструктура, морфологія, гранулометричний склад, адитивні технології, методи штучного інтелекту

1. Вступ

Сучасний етап розвитку матеріалознавства характеризується накопиченням великого обсягу експериментальних даних про взаємозв'язок між структурою та властивостями матеріалів різного функціонального призначення [1–3], які

працюють за різних умов експлуатації [4, 5]. Це, своєю чергою, викликає створення нових, унікальних за властивостями, матеріалів. Процес розроблення, технологічного опрацювання, апробації та впровадження довготривалих, вартісний і складний [6, 7].

За таких умов сталий розвиток матеріалознавства передбачає декілька можливих підходів:

– аналіз існуючої, накопиченої роками, інформації про певні об'єкти дослідження, зокрема, методами машинного навчання (МН) [8] і здійснення екстраполяції отриманих результатів;

– дослідження «зразків-свідків» нових матеріалів традиційними методами з перенесенням узагальнюючих результатів на «еталонні» зразки.

Поєднання традиційних експериментальних досліджень матеріалів з моделями, методами та засобами штучного інтелекту [9, 10] підвищує ефективність процедури розробки та впровадження нових матеріалів. Традиційні підходи дозволяють одержати усю необхідну інформацію про властивості матеріалу [7], а застосування потужних [11] та сучасних засобів МН [12, 13] спрощують, скорочують та здешевлюють цей процес. Це відбувається завдяки розв'язанню задач прогнозування та регресії, класифікації чи кластеризації на невеликій базі експериментальних даних і екстраполюванні результатів на новий матеріал.

Саме тому, актуальним завданням є розробка нових та модифікація існуючих підходів для проектування та конструювання нових матеріалів.

2. Аналіз літературних даних та постановка проблеми

В багатьох випадках традиційні підходи до встановлення взаємозв'язку між структурою та властивостями матеріалів є загальноживаними та себе виправдовують [1, 2]. Проте, коли мова йде про суттєву нелінійність таких взаємозв'язків, доволі важко встановити необхідні параметри. Особливо гострою є проблема опрацювання багатопараметричних залежностей. Саме такі задачі зумовлюють пошук нових, ефективніших способів отримання шуканої інформації.

Застосування інструментарію штучного інтелекту до вирішення прикладних задач матеріалознавства приділено недостатньо уваги, проте інтерес до цього напрямку невпинно зростає. В оглядових працях [8, 14] описано ряд методів штучного інтелекту, в тому числі МН, в режимі з супервізором та без супервізора. Ці методи мають очевидні переваги застосування для попереднього опрацювання даних методом Аналізу Головних Компонент [14]. Проте вони не є інструментами для розв'язання задач регресії чи прогнозування [14].

У [15] використано апарат Штучних Нейронних Мереж (ШНМ) для розв'язання задачі прогнозування температури склування полістиролу. Слід зазначити, що такий підхід для задач прогнозування і класифікації має ряд недоліків, основним з яких є те, що більшість парадигм побудови ШНМ не забезпечують повторюваності розв'язку. У [16] описано розв'язок задачі прогнозування результатів процесу кристалізації селенідів ванадію на основі використання Машини опорних векторів (МОВ). Розв'язок задачі класифікації в галузі матеріалознавства на основі використання такого ж інструменту подано у [8]. Основ-

ним недоліком запропонованих методів є необхідність коректного підбору оптимальних параметрів, зокрема ядра, для забезпечення ефективного результату. У [17] розроблено метод розв'язання задачі регресії з метою визначення високо-ефективних металоорганічних структур здатних утримувати CO₂. Інструментом для цього обрано MOV з ядром у вигляді радіально-базисної функції. Враховуючи високу швидкість роботи методу MOV та точність, яку забезпечує радіально-базисна функція, метод показує задовільні результати. Проте метод чутливий до стандартизації даних та шумів у них.

У [8] описано розв'язок задачі прогнозування коефіцієнтів тертя матеріалів на основі «дерев-рішень». Перевагами цього інструментарію як в задачах прогнозування, регресії, так і у задачах класифікації, є швидкість та точність їх роботи. Проте методи цього класу вимагають правильний підбір оптимальних параметрів для роботи. В інакшому випадку вони займають величезний обсяг пам'яті, що обмежує їх практичне використання. Окрім цього, цей інструментарій показує незадовільні результати на зашумлених даних.

Проведений аналіз літературних джерел свідчить про перспективність застосування алгоритмів машинного навчання для вирішення різноманітних завдань матеріалознавства (прогнозування, виявлення аномалій, класифікація, розпізнавання та регресії). Проте основною проблемою залишається правильний вибір алгоритму машинного навчання. З одного боку він повинен забезпечувати високу точність роботи, а з іншої сторони – бути швидким та простим, не вимагати великих обчислювальних ресурсів та обсягів пам'яті комп'ютера.

Відомі методи не завжди забезпечують поєднання вищевказаних характеристик, що накладає ряд обмежень на їхнє практичне застосування. У зв'язку з цим, важливим завданням залишається удосконалення існуючих та розробка нових методів штучного інтелекту в галузі матеріалознавства.

3. Мета та задачі дослідження

Метою роботи є розроблення методу ідентифікації відповідності титанових сплавів за параметрами мікроструктури та властивостей їх порошкових фракцій шляхом розв'язання задачі класифікації засобами машинного навчання.

Для досягнення мети необхідно вирішити такі завдання:

- провести експериментальні дослідження з визначення мікроструктури та властивостей порошків титанових сплавів різних фракцій та мікрогеометрії поверхні, сформулювати навчальну та тестову вибірки;

- застосувати поліном Колмогорова-Габора і алгоритм Випадкового лісу для розв'язання задачі класифікації. Дослідити таку композицію методу на предмет точності ідентифікації об'єкту дослідження при мінімізації часових ресурсів, необхідних для реалізації процедур навчання;

- експериментальним шляхом встановити параметри методу машинного навчання, які б забезпечували оптимальний результат з огляду на час та точність його роботи;

- порівняти точність роботи запропонованого методу з відомими та розробити рекомендації щодо його застосування.

4. Вихідні дані та методики дослідження

4. 1. Дослідження властивостей матеріалу

Сферичні порошки титанових сплавів отримані за технологією відцентрового розпилення електроду [18], а несферичні – за технологією гідрування-дегідрування [19].

Формування вихідної бази даних для реалізації процесу машинного навчання виконували як на основі попередньо проведених авторами досліджень морфології, елементного та гранулометричного складу порошків титанових сплавів різних систем [20, 21], так й з використанням літературних джерел [22, 23].

Морфологія будови поверхні частинок вивчалась з використанням сканувального електронного мікроскопу EVO 40XVP.

Розподіл порошків за фракціями виконували ситовим методом згідно ДСТУ ISO 565:2007. Для оцінки мікрогеометрії будови поверхні, а також розширеного фракційного аналізу порошків застосовували програмний продукт для аналізу мікроструктур ImageJ [24]. Ступінь неоднорідності (полідисперсність) порошку, що залежить від середнього розміру домінуючих частинок в певній фракції та стандартного відхилення розміру частинок порошку від їх середнього розміру, визначалась побудовою кривої Гауса на основі гістограм розподілу частинок в певній фракції [25].

Для скорочення тривалості та здешевлення досліджень властивостей сферичних та несферичних порошків титанових сплавів можна застосувати інструментарій штучного інтелекту [10]. Проведений огляд літературних джерел показав доцільність застосування алгоритмів машинного навчання до розв'язання поставленої задачі, зокрема на основі алгоритму Випадкового лісу та полінома Колмогорова-Габора.

4. 2. Алгоритм Випадкового лісу

Алгоритми машинного навчання на основі «дерев-рішень» з часу створення і до сьогодні користуються великою увагою. Такі методи застосовуються під час розв'язання прикладних задач в різних галузях.

Алгоритм побудови одного бінарного «дерева-рішень» працює за схемою жадібного алгоритму. Під час кожної ітерації для вхідної множини векторів навчальної вибірки будується гіперповерхня розбиття простору класів, яка мінімізує середню міру неоднорідності двох отриманих підмножин. Ця процедура виконується рекурсивно для кожної отриманої підмножини до тих пір, доки не будуть досягнуті критерії зупинки [26].

Очевидно, що при побудові моделі на основі лише одного «дерева-рішень» можна отримати рішення чутливе до шумів. Тому доцільніше використовувати ансамбль із декількох «дерев», що характерно для алгоритму Випадкового лісу. Це зумовлює ряд переваг, зокрема:

- комбінуючи відгуки кожного дерева, можна отримати стійкий та ефективний розв'язок поставленої задачі;
- ансамбль декількох дерев дозволяє уникати проблем, пов'язаних із пере-навчанням методу, або як мінімум, зменшити [27];

– незалежна процедура навчання кожного окремого «дерева» з ансамблю на своїй частині вибірки забезпечує можливість застосування методів цього класу в системах розподілених обчислень, зокрема із використанням методології [28].

Задля розв'язання задачі класифікації, алгоритм Випадкового лісу використовує велику кількість «дерев», кожне з яких навчається на окремій підмножині із множини векторів усієї навчальної вибірки. Відгук кожного з «дерев» ансамблю береться до розгляду наступним чином. Кожен з них помічається щодо приналежності типу відповідності, далі вони усереднюються, і на підставі їх найбільшої кількості визначається переможець.

Проте усереднення не завжди найефективніший варіант асамблювання Випадкового лісу. Існують і інші [29], такі як просте голосування, зважене голосування, суміш експертів, тощо. Проте їхнє застосування обмежується задачами, які вимагають реалізації швидкої процедури навчання.

4. 3. Поліном Колмогорова-Габора

Поліном Колмогорова-Габора дуже часто застосовується як ефективний інструмент апроксимації багатопараметричних залежностей. Цей інструмент дозволяє здійснювати моделювання з дуже високою точністю в режимі узагальнення [30].

Велику роль при цьому відіграє степінь поліному. Зі збільшенням степеня поліному покращуються можливості апроксимації залежностей з суттєвою нелінійністю, однак погіршуються властивості генералізації даних. Проведені експериментальні дослідження із наявними даними дозволили обрати поліном Колмогорова-Габора другого степеня в якості моделі оптимальної складності. Цей поліном можна записати у такому вигляді:

$$Y(x_1, \dots, x_n) = ai_0 + \sum_{i_1=1}^n ai_1 \times xi_{i_1} + \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=i_1}^n ai_1i_2 \times xi_{i_1} \times xi_{i_2}, \quad (1)$$

де n – число змінних кожного вектору даних.

Знаходження коефіцієнтів цього поліному являється нетривіальною задачею. Існуючі методи або доволі складні, або дуже тривалі. Окрім цього вони не завжди забезпечують достатню точність результату, зокрема при побудові системи рівнянь з початковою обумовленістю, або у випадку суттєвої корельованості входів, чи наближенні задачі до майже виродженої.

5. Результати формування вихідної бази даних та комп'ютерного моделювання

5. 1. Формування вихідної бази даних

На рис. 1 подано морфологію досліджених сферичних та несферичних порошків систем Ti-6Al-4V та Ti-Al-V-Zr.

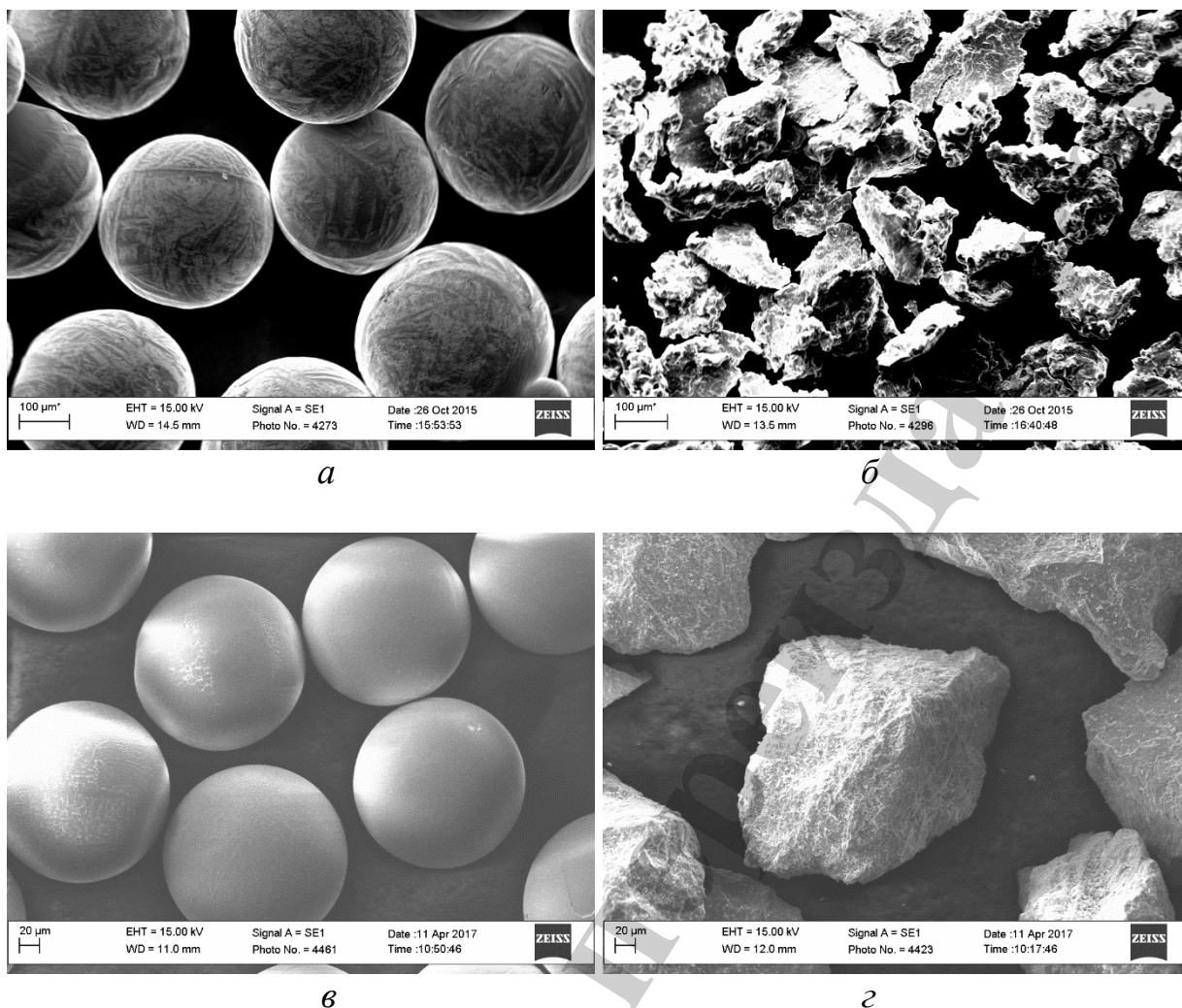


Рис. 1. Морфологія порошків титанових сплавів:
а, б - система Ti-6Al-4V [18]; *в, г* – система Ti-Al-V-Zr [19]

Слід зазначити, що основні характеристики, за якими досліджувані порошки будуть віднесені до певних класів (відмінні властивості матеріалу, оптимальні властивості матеріалу, можливі дефекти в матеріалі і бракований матеріал) (рис. 2), є середній діаметр частинок порошку (рис. 3) та полідисперсність (рис. 4), які частково взяті з [31, 32].

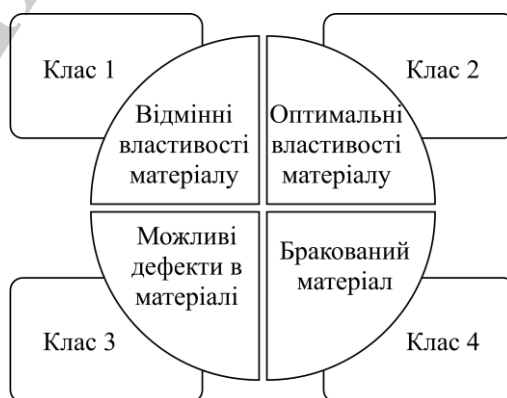


Рис. 2. Класи відповідності порошків досліджуваних титанових сплавів

Досліджувані матеріали	Діапазон діаметрів частинок, мкм				
	-630+270	-400+230	-250+150	-100+150	-63+27
BT1-0	769	584	312	171	83
Ti-Al-Mo-Zr	783	537	348	164	72
Ti-6Al-4V	811	517	321	183	78
Ti-Al-V-Zr	743	512	315	173	75

a

Досліджувані матеріали	Діапазон діаметрів частинок, мкм				
	-630+270	-400+230	-250+150	-100+150	-63+27
BT1-0	864	612	371	239	89
Ti-Al-Mo-Zr	796	583	276	161	68
Ti-6Al-4V	839	520	311	201	70
Ti-Al-V-Zr	767	517	348	221	64

б

Рис. 3. Середній діаметр частинок порошків досліджуваних титанових сплавів:
a – сферичні; *б* – несферичні

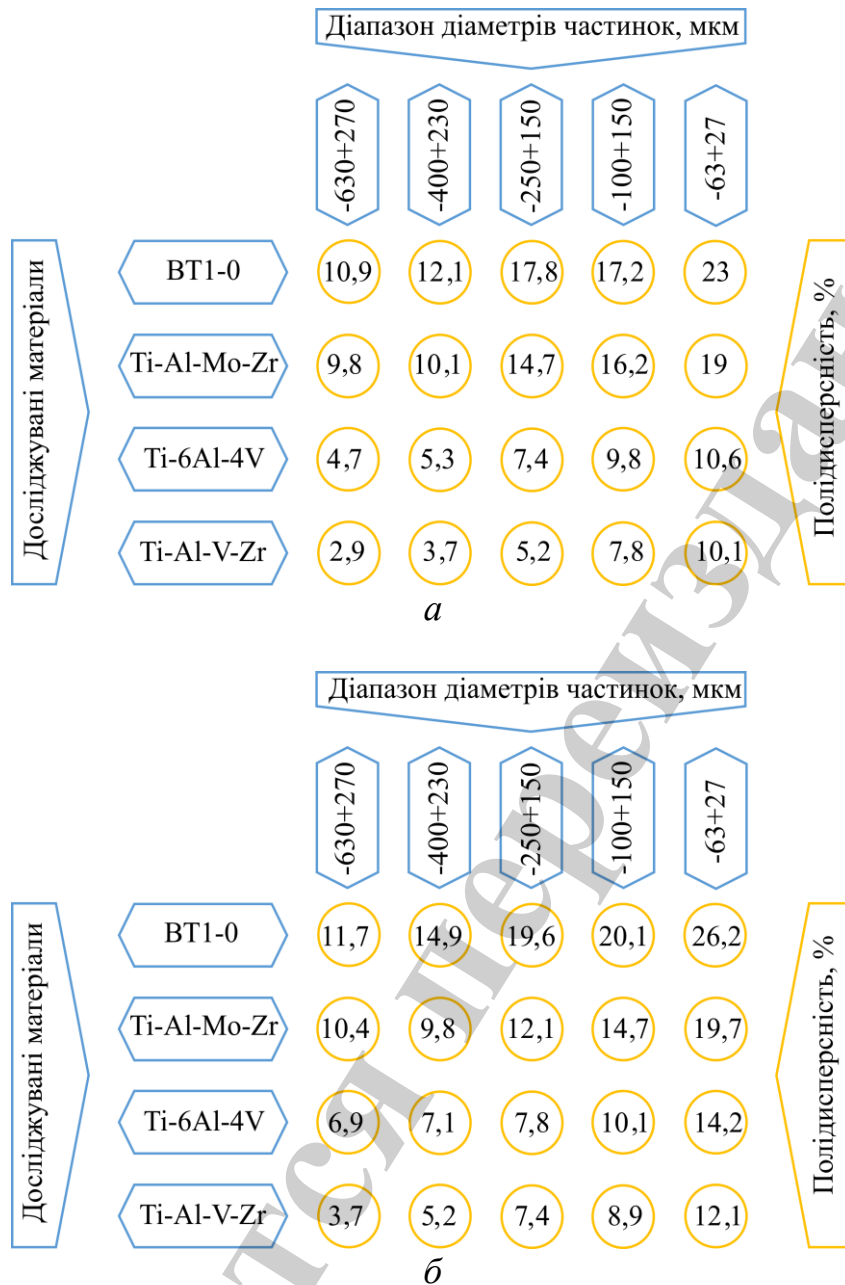


Рис. 4. Полідисперсність частинок порошоків досліджуваних титанових сплавів: *a* – сферичні; *б* – несферичні

Алгоритмічна реалізація методу передбачає створення бази даних, яка в нашому випадку складається з 480 векторів, кожен з яких містить 20 вхідних ознак (рис. 5) [10]. Саме ці ознаки визначають приналежність до одного з чотирьох означених вище класів матеріалу (рис. 4).

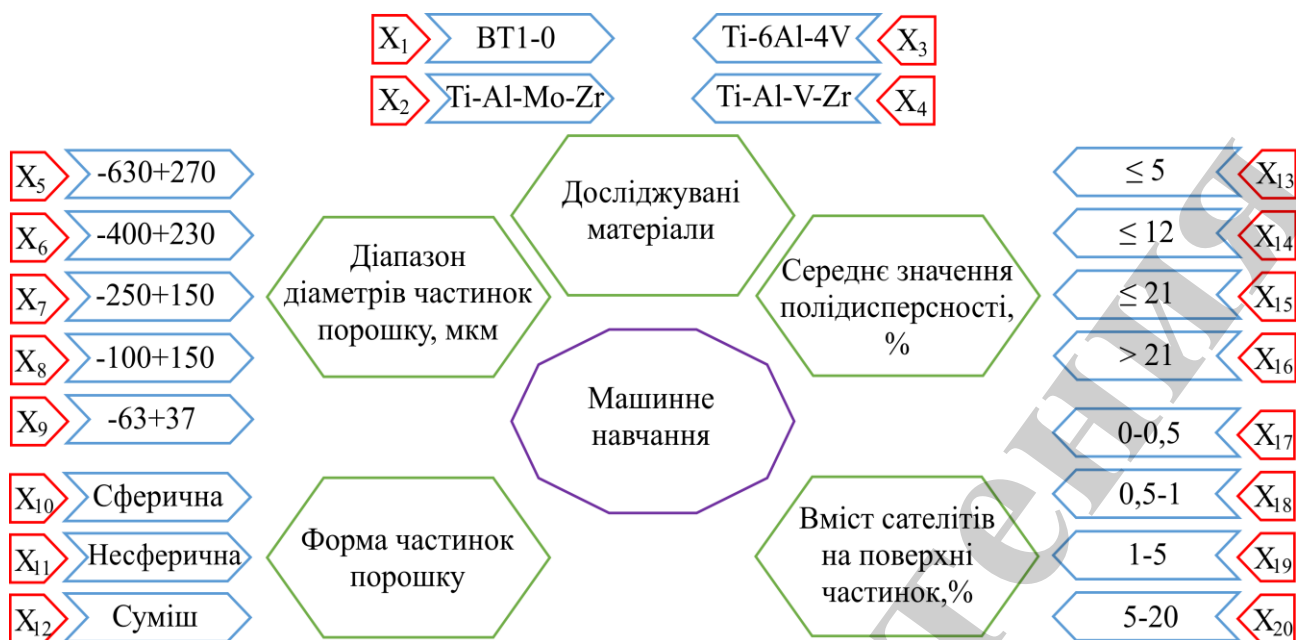


Рис. 5. Схематичне представлення вихідної бази даних для моделювання

У випадку опрацювання зображень з великою кількістю дрібних деталей, для пришвидшення оцінки усіх необхідних параметрів досліджуваного матеріалу можна використовувати геометричні методи забезпечення надвисокої роздільної здатності зображень.

5. 2. Формування вибірки для реалізації процедур машинного навчання

На основі експериментальних даних було сформовано вибірку даних для розв'язання поставленої у роботі задачі. На рис.6, а у 2D просторі візуалізовано 4 досліджених класи матеріалу (рис.2) на основі 20 вхідних ознак (рис.5). Для цього застосовано метод машинного навчання FreeViz з використанням програмного середовища Orange software (version 3.8.0.) [33]. Різними кольором та формою виділено ознаки чотирьох різних класів. З метою наочнішого представлення вхідних даних, на рис. 6, б наведено результати візуалізації після процедури оптимізації вищевказаним методом. Слід зазначити, що процедуру оптимізації проведено виключно з метою більш чіткого візуального представлення різних класів.

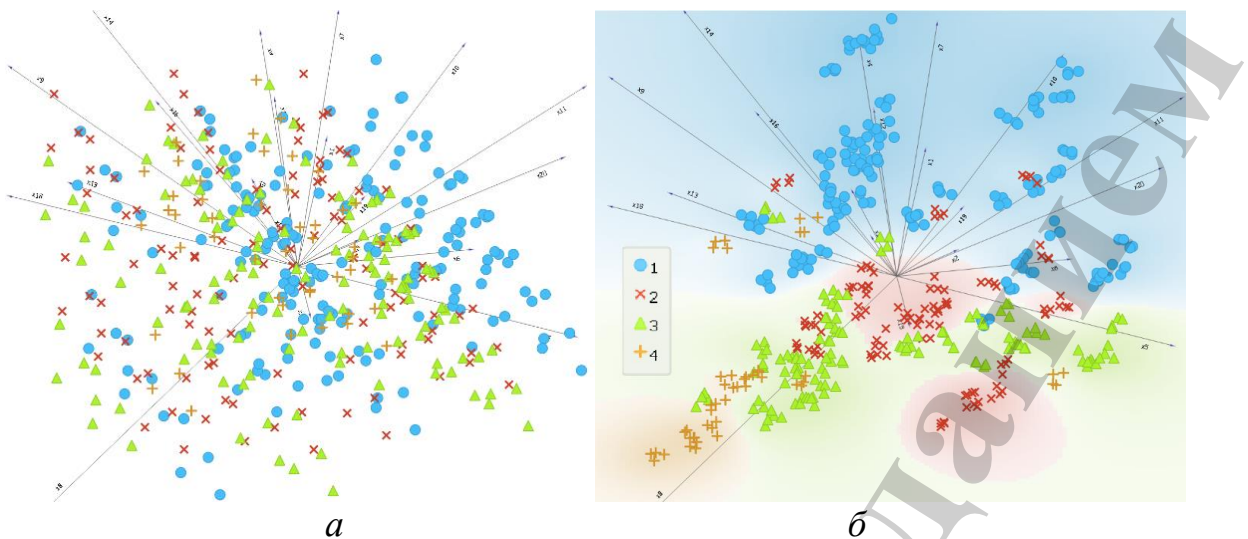


Рис. 6. 2D Візуалізація 4 класів матеріалу з 20 вхідними ознаками:
a – до оптимізації; *б* – після оптимізації

Як видно з рис. 6, б, експериментальні дані згруповані в кольорові області, кожна з яких відображає окремий клас порошкового матеріалу. Синя область виокремлює перший клас, тобто матеріал, який характеризується відмінними властивостями. Червона область відповідає другому класу матеріалу з оптимальними характеристиками. Зелена область об'єднує дані, отримані для матеріалу, у якому виявлено дефекти, тобто який не рекомендовано застосовувати для виготовлення відповідальних деталей. Четвертий клас або помаранчева область згрупує дані з характеристиками бракованого матеріалу, який взагалі не придатний для використання.

480 векторів експериментальних даних, кожен з яких характеризується 20 ознаками, було випадковим чином розділено на навчальну та тестову вибірку. Співвідношення такого поділу – 80 і 20 % відповідно. На рис. 7 наведено гістограми кількісного представлення векторів даних кожного з чотирьох класів, які використовувалися під час моделювання для обох типів вибірок.

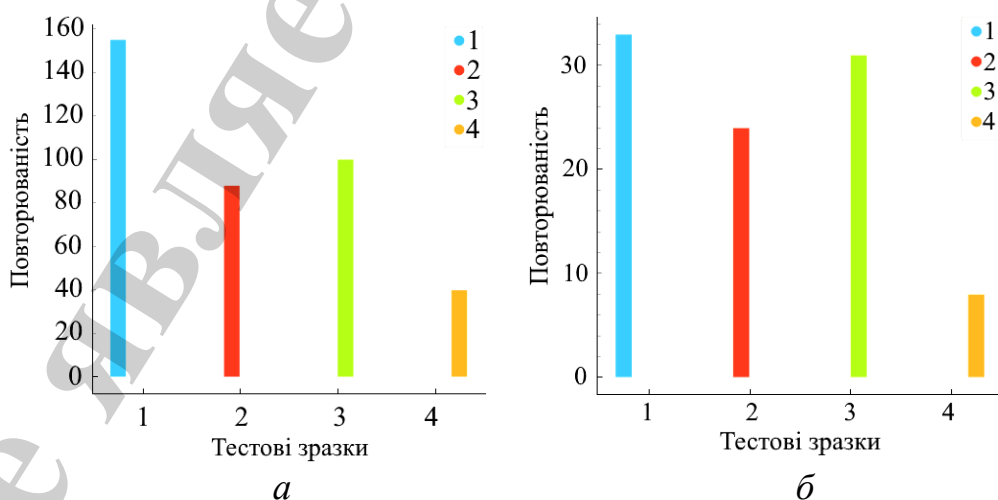


Рис. 7. Співвідношення кількості векторів даних кожного з чотирьох класів: *a* – навчальної вибірки; *б* – тестової вибірки.

Найбільш представленим для обох вибірок є перший клас, тобто випадок, коли матеріал характеризується відмінними властивостями та найменш представлено четвертий досліджений клас матеріалу, що не рекомендується до застосування (рис. 7).

5. 3. Композиція запропонованого методу класифікації

У роботі пропонується комбіноване використання полінома Колмогорова-Габора та алгоритму Випадкового лісу для підвищення точності розв'язання задачі ідентифікації класу матеріалу до запропонованих характеристик. Вхідні характеристики з рис. 5 ($x_1 \dots x_{20}$) кожного вектора представляються у вигляді членів полінома, згідно (1). Алгоритм Випадкового лісу використовується для знаходження коефіцієнтів поліному Колмогорова-Габора.

Доцільність використання розробленого методу для розв'язання поставленої задачі впливає із наступних тверджень:

- забезпечує можливість ефективного опрацювання великої кількості ознак кожного вхідного вектора (кількість ознак під час представлення у вигляді членів полінома Колмогорова-Габора суттєво зростає);
- дозволяє ефективно працювати як з малими вибірками даних при забезпеченні достатнього рівня генералізації, так і з великими – при мінімізації ймовірності перенавчання.

На основі отриманих коефіцієнтів відбувається застосування полінома Колмогорова-Габора, який, маючи високі апроксимаційні властивості, забезпечує високоточний результат.

5. 4. Комп'ютерне моделювання ідентифікації класу матеріалу

Моделювання розробленого у роботі методу ідентифікації класів матеріалу відбувалося на розробленому авторами програмному забезпеченні. Для цього використано ряд бібліотек мови програмування Python [34]. Основні параметри розробленого методу такі:

- степінь полінома – 2;
- кількість дерев методу Випадкового лісу – 9;
- мінімальна кількість об'єктів, при якій виконується розщеплення – 2;
- максимальна глибина дерев;
- критерій розщеплення – класичний, Джіні.

Точність роботи методу оцінювалася кількістю правильно класифікованих зразків до розмірності тестової вибірки у відсотковому співвідношенні.

Встановлено, що точність роботи розробленого методу при таких параметрах становить 96,88 %.

6. Обговорення результатів роботи розробленого методу

Комбіноване використання полінома Колмогорова-Габора та алгоритму Випадкового лісу забезпечує:

- з одного боку – достатні генералізуючі властивості для побудови ефективних моделей навчання;

– з іншої сторони – збереження переваг додаткового підвищення точності результату.

Обидві переваги є важливими з огляду очікуваних великих витрат на створення нового матеріалу з незадовільними властивостями у випадку помилкової ідентифікації. Це, своєю чергою, негативно позначиться на працездатності конструкції аерокосмічної техніки, деталі якої планується виготовляти з дослідних матеріалів методом 3D-друку.

Оскільки збільшення кількості дерев алгоритму Випадкового лісу збільшує як точність, так і час роботи розробленого методу, у роботі досліджено мінімальну кількість дерев, яка б забезпечувала найкращий результат. На рис. 8 наведено експериментальне порівняння точності навчання та тестування розробленого методу при зміні кількості дерев алгоритму машинного навчання (від 1 до 10) за інших рівних умов.

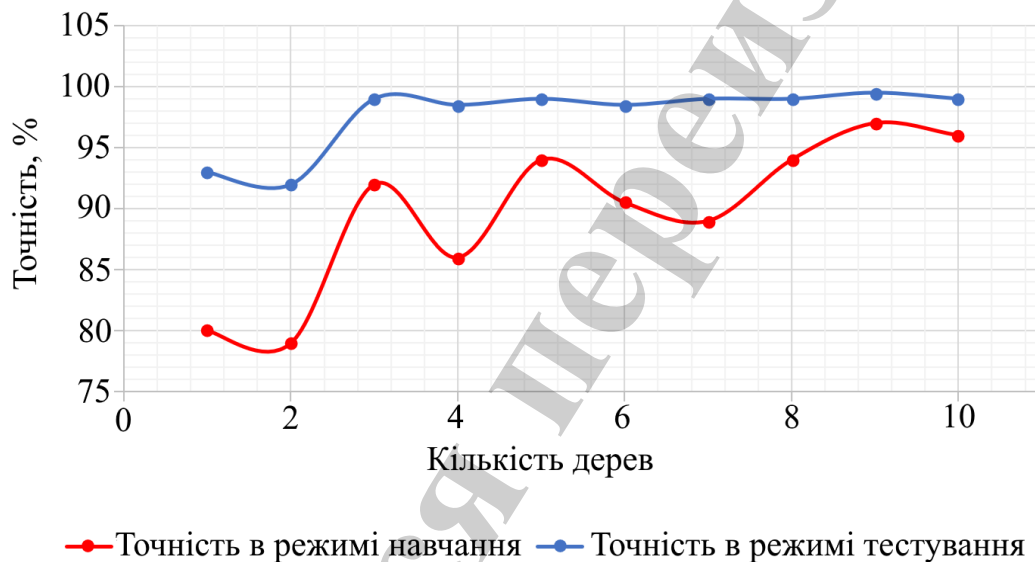


Рис. 8. Вплив кількості дерев розробленого методу на точність його роботи

Як видно з рис. 8, найбільшу точність роботи методу отримано при найменш можливій кількості дерев – 9. Окрім забезпечення найбільшої точності зазначений параметр методу забезпечує найменшу різницю між точністю навчання та тестування, що також видно з рис. 8.

Порівняння результатів роботи розробленого методу проводилося з результатами за існуючими методами:

- Випадковий ліс;
- Логістична регресія;
- Машина опорних векторів.

У табл. 1 подано експериментальні результати моделювання усіх методів, де наведено точність як в режимі навчання так і у режимі застосування.

Таблиця 1

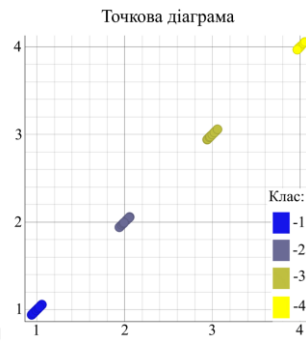
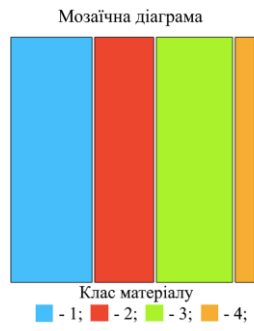
Результати порівняння розробленого методу з результатами за існуючими

Метод	Точність навчання, %	Точність тестування, %
Розроблений метод	100	96,88
Випадковий Ліс	100	93,75
Логістична регресія	78,85	63,54
Машина опорних векторів	76,5	62,5

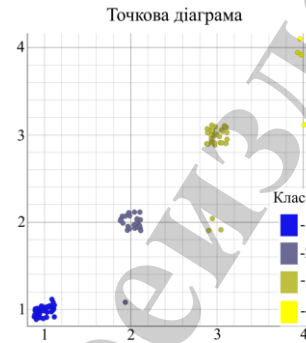
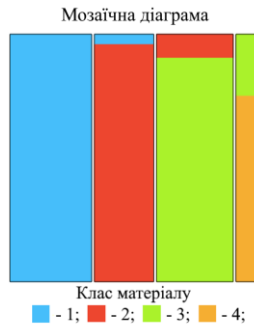
Як видно з табл. 1, найкращі результати, тобто 96,88 % точності, отримано з використанням розробленого методу. Найгірші результати при розв'язанні поставленої у роботі задачі класифікації отримано двома відомими методами – Машиною опорних векторів та Логістичною регресією.

Розглянемо результати моделювання використаних у роботі методів більш детально. Для цього, на рис. 9 представлено візуальну оцінку роботи у вигляді мозаїчної та точкової діаграм з використанням Orange software (version 3.8.0.) [33]. Точкова діаграма надає візуальну інформацію про те, скільки членів класу невірно ідентифіковано, а мозаїчна діаграма наочно демонструє, у який з класів віднесено ці зразки. На рис. 9, а для обох діаграм відображено початкові умови – ідеальний випадок, коли всі зразки правильно ідентифіковано.

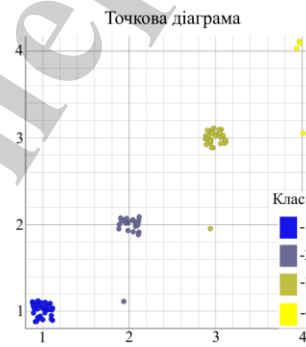
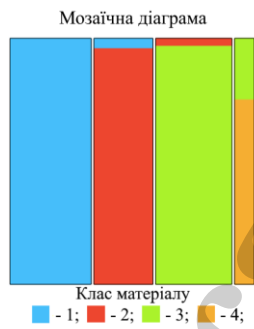
Ширина стовпців мозаїчної діаграми вказує на кількість представників того чи іншого класу. Числове співвідношення цього показника можна знайти на рис. 7. Точкова діаграма відображає 4 класи матеріалу по діагоналі починаючи від 1. Вісь x відповідає за вірні значення класів, вісь y – за отримані одним із описаних методів. Задля кращого візуального сприйняття даних використано параметр Jittering = 1 % програмного середовища Orange, що дозволяє оцінити кількість елементів кожного класу. Насправді, усі члени кожного окремого класу накладаються при візуалізації і знаходяться в одній точці.



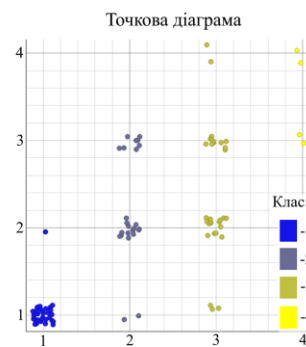
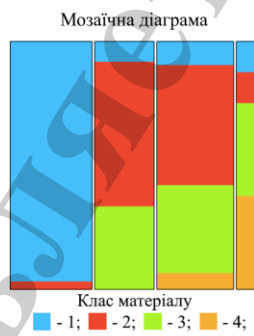
а



б

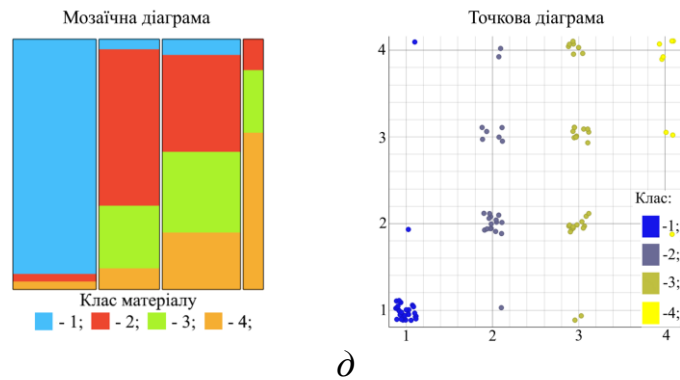


в



г

Не являється переміщенням



д

Рис. 9. Порівняння описаних у роботі методів на основі візуалізації результатів роботи: *a* – вихідні дані; *б* – Випадковий ліс; *в* – розроблений метод; *г* – Машина опорних векторів; *д* – Логістична регресія

Інформація з обох діаграм є важливою для поставленої задачі. Як вже згадувалося вище, точність класифікації відіграє важливу роль, зокрема у питаннях вартості розроблення матеріалу, особливо у випадку некоректної роботи методу. Невірно класифіковані зразки можуть спричинити значні фінансові втрати у випадку, якщо деталь, створена на основі бракованої сировини, швидко вийде з ладу і може зумовити вихід з ладу усього пристрою. Проте не менш важливим є те, у який клас буде віднесено невірно ідентифікований зразок. Наприклад, з рис. 9, *г* (результати роботи МОВ) видно, що три члени класу 3, тобто матеріал із браком, ідентифіковано як клас 1, тобто матеріал з відмінними характеристиками, а один член класу 4 віднесено до класу матеріалу із оптимальними властивостями (клас 2). Цей результат є критичним з огляду на те, що на основі такої ідентифікації, матеріал який не рекомендується використовувати для відповідальних деталей, може бути використано як такий, що володіє відмінними характеристиками. Така ж ситуація і при застосуванні методу Логістичної регресії. Два зразки з класу – матеріал з браком – класифіковано як такі, що відносяться до першого класу, та один зразок класу матеріалу, який не рекомендується до використання ідентифіковано як клас із оптимальними характеристиками.

Навіть не дивлячись на низькі результати класифікації методами Мащини опорних векторів та Логістичною регресією, вищеописані результати є неприпустимими, оскільки на їх основі можливе прийняття невірного рішення, яке зумовить негативні наслідки. Для розв'язання поставленої задачі подібні методи використовувати не рекомендується.

Аналізуючи розроблений метод (рис. 9, *в*), та найбільш подібний до нього – Випадковий ліс (рис. 9, *б*) можна зазначити таке. Ці методи ідентифікували відповідно один та два зразки класу 4 як клас 3, три і один зразок класу 3 (відповідно для Випадкового лісу та Розробленого методу) класифіковано як клас 2. Обидва методи класифікували один зразок класу матеріалу з оптимальними властивостями до класу матеріалу, що характеризуються відмінними властивостями.

Такі результати є задовільними з погляду можливих незначних втрат при невірній ідентифікації, оскільки ситуації де матеріал з браком ідентифікується як матеріал із відмінними властивостями і т. д., при застосуванні цих методів не

мають місця. Стосовно точності результатів розв'язання задачі класифікації, розроблена комбінація використання полінома Колмогорова-Габора та алгоритму Випадкового лісу показує значно кращі результати за класичний алгоритм Випадкового лісу. Тому цей метод можна використовувати під час розв'язання практичних задач матеріалознавства, що критично чутливі до точності результату.

Подальші дослідження можуть вестися в напрямку застосування нових критеріїв розщеплення для розробленого методу. Для підвищення точності розв'язання задач класифікації та кластеризації, регресії та прогнозування для вирішення різноманітних задач матеріалознавства також планується застосування нейроподібних структур Моделі Послідовних Геометричних Перетворень [12].

7. Висновки

1. На основі експериментальних даних щодо властивостей порошків титанових сплавів виділено 20 ознак їх приналежності до певного класу вихідної сировини для адитивних технологій. Це дозволило побудувати навчальну та тестову вибірки для реалізації процедур машинного навчання з метою класифікації порошкових матеріалів за параметрами мікроструктури, елементного та фракційного складу.

2. Розроблено новий метод класифікації на основі комбінованого використання алгоритму Випадкового лісу та полінома Колмогорова-Габора. Встановлено, що така комбінація забезпечила високу точність результату розв'язання задачі класифікації – 96,88 %.

3. Доцільність використання розробленого методу підтверджено експериментальним порівнянням результатів роботи з існуючими методами. Встановлено, що розроблений метод дозволяє підвищити точність моделювання на 34,38; 33,34 та 3,13 % порівняно з методами: Машина опорних векторів, Логістична регресія та Випадковий ліс відповідно.

Література

1. Duriagina Z. A., Kovbasyuk T. M., Bepalov S. A. The Analysis of Competitive Methods of Improvement of Operational Properties of Functional Layers of Flat Heating Elements // *Uspehi Fiziki Metallov*. 2016. Vol. 17, Issue 1. P. 29–51. doi: 10.15407/ufm.17.01.029
2. Pidkova V. Structure and properties of Mg, Al, Ti oxide and nitride layers formed by ion-plasma sputtering // *Functional materials*. 2015. Vol. 22, Issue 1. P. 34–39. doi: 10.15407/fm22.01.034
3. Magnetometric analysis of surface layers of 12X18H10T steel after ion-beam nitriding / Duryagina Z. A., Bepalov S. A., Borysyuk A. K. Pidkova V. Ya. // *Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*. 2011. Vol. 33, Issue 5. P. 615–622.
4. Influence of the mode of thermal treatment and load ratio on the cyclic crack-growth resistance of wheel steels / Ostash O. P., Andreiko I. M., Kulyk V. V., Babachenko O. I., Vira V. V. // *Materials Science*. 2009. Vol. 45, Issue 2. P. 211–219. doi: 10.1007/s11003-009-9177-4
5. Influence of braking on the microstructure and mechanical behavior of railroad wheel steels / Ostash O. P., Andreiko I. M., Kulyk V. V., Vavrukh V. I. // *Ma-*

terials Science. 2013. Vol. 48, Issue 5. P. 569–574. doi: 10.1007/s11003-013-9539-9

6. On the concept of selection of steels for high-strength railroad wheels / Ostash O. P., Anofriev V. H., Andreiko I. M., Muradyan L. A., Kulyk V. V. // *Materials Science*. 2013. Vol. 48, Issue 6. P. 697–703. doi: 10.1007/s11003-013-9557-7

7. Fatigue crack growth resistance of welded joints simulating the weld-repaired railway wheels metal / Ostash O. P., Kulyk V. V., Poznyakov V. D., Haivorons'kyi O. A., Markashova L. I., Vira V. V. et. al. // *Archives of Materials Science and Engineering*. 2017. Vol. 2, Issue 86. P. 49–52. doi: 10.5604/01.3001.0010.4885

8. Mueller T., Kusne A. G., Ramprasad R. Machine Learning in Materials Science // *Reviews in Computational Chemistry*. 2016. P. 186–273. doi: 10.1002/9781119148739.ch4

9. Basic Components of Neuronetworks with Parallel Vertical Group Data Real-Time Processing / Tsmots I., Teslyuk V., Teslyuk T., Ihnatyev I. // *Advances in Intelligent Systems and Computing*. 2017. P. 558–576. doi: 10.1007/978-3-319-70581-1_39

10. Determination of the best microstructure and titanium alloy powders properties using neural network / Duriagina Z. A., Tkachenko R. O., Trostianchyn A. M., Lemishka I. A., Kovalchuk A. M., Kulyk V. V., Kovbasyuk T. M. // *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*. 2018. Vol. 87, Issue 1. P. 25–31. doi: 10.5604/01.3001.0012.0736

11. Imbalance Data Classification via Neural-Like Structures of Geometric Transformations Model: Local and Global Approaches / Tkachenko R., Doroshenko A., Izonin I., Tsymbal Y., Havrysh B. // *Advances in Intelligent Systems and Computing*. 2018. P. 112–122. doi: 10.1007/978-3-319-91008-6_12

12. Narushynska O., Teslyuk V., Vovchuk B.-D. Search model of customer's optimal route in the store based on algorithm of machine learning A // 2017 12th International Scientific and Technical Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT). 2017. doi: 10.1109/stc-csit.2017.8098787

13. Shakhovska N. B., Noha R. Y. Methods and Tools for Text Analysis of Publications to Study the Functioning of Scientific Schools // *Journal of Automation and Information Sciences*. 2015. Vol. 47, Issue 12. P. 29–43. doi: 10.1615/jautomatinfscien.v47.i12.30

14. Rajan K. Materials informatics // *Materials Today*. 2005. Vol. 8, Issue 10. P. 38–45. doi: 10.1016/s1369-7021(05)71123-8

15. Prediction of glass transition temperatures for polystyrenes from cyclic dimer structures using artificial neural networks / Xu J., Zhu L., Fang D., Liu L., Xu W., Li Z. // *Fibers and Polymers*. 2012. Vol. 13, Issue 3. P. 352–357. doi: 10.1007/s12221-012-0352-0

16. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments / Raccuglia P., Elbert K. C., Adler P. D. F., Falk C., Wenny M. B., Mollo A. et. al. // *Nature*. 2016. Vol. 533, Issue 7601. P. 73–76. doi: 10.1038/nature17439

17. Rapid and Accurate Machine Learning Recognition of High Performing Metal Organic Frameworks for CO₂ Capture / Fernandez M., Boyd P. G., Daff T. D., Aghaji M. Z., Woo T. K. // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2014. Vol. 5, Issue 17. P. 3056–3060. doi: 10.1021/jz501331m

18. Зленко М., Попович А., Мутылина И. Аддитивные технологии в машиностроении. Санкт-Петербург, 2013. 221 с.
19. Хазнаферов М. В., Овчинников А. В., Янко Т. Б. Технология получения «low-cost» порошков легированного титана для аддитивных процессов // Титан. 2015. № 2. С. 31–36.
20. Гранулометричні характеристики порошку титанового сплаву VT20 отриманого методом відцентрового плазмового розпилення електроду / Дурягіна З. А., Тростянчин А. М., Лемішка І. А., Скребцов А. А., Овчинников О. В. // Металознавство та обробка металів. 2017. № 1. С. 45–51.
21. The influence of chemical-thermal treatment on granulometric characteristics of titanium sponge powder / Duriagina Z., Trostyanchyn A., Lemishka I., Skrebtsov A., Ovchinnikov O. // Ukrainian Journal of Mechanical Engineering and Materials Science. 2017. Vol. 3, Issue 1. P. 73–80.
22. Овчинников А. В., Ольшанецкий В. Е., Джуган А. А. Применение несферических гидрированных и дегидрированных порошков титана для получения изделий в аддитивных технологиях // Вестник двигателестроения. 2015. № 1. С. 114–117.
23. Петрик И. А., Овчинников А. В., Селиверстов А. Г. Разработка порошков титановых сплавов для аддитивных технологий применительно к деталям ГТД // Авиационно-космическая техника и технология. 2015. № 8. С. 11–16.
24. Broeke J., Perez J. M. M., Pascau J. Image Processing with ImageJ. 2nd ed. Packt Publishing, 2015. 256 p.
25. Гаврилова Н. Н., Назаров В. В., Яровая О. В. Микроскопические методы определения размеров частиц дисперсных материалов: учеб. пос. Москва, 2012. 52 с.
26. Shanyavskiy A. A., Banov M. D., Zakharova T. P. Principles of physical mesomechanics of nanostructural fatigue of metals. I. Model of subsurface fatigue crack nucleation in VT3-1 titanium alloy // Physical Mesomechanics. 2010. Vol. 13, Issue 3-4. P. 133–142. doi: 10.1016/j.physme.2010.07.004
27. Модель Random Forest для классификации, реализация на с#. URL: <https://habr.com/post/215453>
28. Random Forest: прогулки по зимнему лесу. URL: <https://habr.com/post/320726>
29. Information technologies of optimization of structures of the systems are on the basis of combinatorics methods / Oleg R., Yurii K., Oleksandr P., Bohdan B. // 2017 12th International Scientific and Technical Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT). 2017. doi: 10.1109/stc-csit.2017.8098776
30. Jordan M. I., Jacobs R. A. Hierarchical Mixtures of Experts and the EM Algorithm // Neural Computation. 1994. Vol. 6, Issue 2. P. 181–214. doi: 10.1162/neco.1994.6.2.181
31. Dronyuk I., Fedevych O., Poplavska Z. The generalized shift operator and non-harmonic signal analysis // 2017 14th International Conference The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM). 2017. doi: 10.1109/cadsm.2017.7916092
32. Titanium Powder Metallurgy: Science, Technology and Applications / M.

Qian, F. H. Froes (Eds.). Butterworth-Heinemann, 2015. 628 p. doi: 10.1016/c2013-0-13619-7

33. Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications / C. Leyens, M. Peters (Eds.). Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2003. 532 p. doi: 10.1002/3527602119

34. Data Mining Fruitful and Fun. URL: <https://orange.biolab.si>

35. The Python Standard Library. URL: <https://docs.python.org/3/library/index.html>

Только для чтения