



TEKNILLINEN TIEDEKUNTA

# **Koneoppimisen mahdollisuuksia terästudkimuksessa**

Timo Veijola

Konetekniikka  
Kandidaatintyö  
Maaliskuu 2022

# TIIVISTELMÄ

Koneoppimisen mahdollisuuksia terästudkimuksessa

Timo Vejjola

Oulun yliopisto, Konetekniikan tutkinto-ohjelma

Kandidaatintyö 2022, 43 s.

Työn ohjaaja yliopistolla: Olli Nousiainen

Työssä tarkastellaan koneoppivien mallien tarjoamia uusia mahdollisuuksia terästudkimuksen näkökannalta. Teoriaosuudessa käydään läpi datan rooli ja sen käsittely koneoppivien mallien kannalta, sekä perusprosessi koneoppivan mallin koostamisen takana. Tekstin painotus on materiaalitekniikan asiantuntijan osuudessa mallien kehittämisessä terästudkimuksessa ja -teollisuudessa. Erityyppisten koneoppivien mallien avulla saavutettuja tuloksia havainnollistetaan kirjallisuuden esimerkkien kautta, jotka osoittavat niiden menestyksen mikrorakenteiden karakterisoinnissa, teräksen valmistuksen prosessiparametrien optimoinnissa ja uusien seostusten kehittämisessä. Tutkielma tarjoaa pohjan mallien kehitykselle yhteistyössä tietojenkäsittelytieteiden ja muiden asiantuntijoiden kanssa, osana modernia T&K-ympäristöä sekä olemassa olevia tietokantoja. Sen oppeja voidaan yleistää myös terästudkimuksen ulkopuolelle.

*Asiasanat: Koneoppiminen, metallurgia, materiaali-informatiikka, teräs*

# ABSTRACT

Possibilities of machine learning in steel research

Timo Vejjola

University of Oulu, Degree Programme of Mechanical Engineering

Bachelors's thesis 2022, 43 pp.

Supervisor at the university: Olli Nousiainen

This thesis investigates the new possibilities that machine learning offers from the perspective of steel research. In the theory section the role and modification of data is described in conjunction with the basics of compiling a machine learning model. The emphasis of the work is on the part that a materials subject matter expert plays in the development of a machine learning model for steel industry or research. The success of different machine learning methods is demonstrated through literary examples in microstructural characterization, process optimization and synthesis of new alloy compositions. The thesis offers the basics needed for model development as a part of a modern R&D environment including existing databases and experts from computer science and other relevant fields. The knowledge presented can be generalized beyond steel research.

*Keywords: Machine learning, metallurgy, materials informatics, steel*

# SISÄLLYSLUETTELO

TIIVISTELMÄ

ABSTRACT

SISÄLLYSLUETTELO

1 JOHDANTO .....	6
1.1 Terästudkimuksen taustaa .....	6
2 KONEOPPIVAT MALLIT .....	8
2.1 Mitä koneoppiminen on?.....	8
2.2 Data mallien pohjana.....	9
2.2.1 Datan määrä ja laatu .....	10
2.3 Datan lähteitä .....	12
2.3.1 Tulevaisuuden dataprosessi .....	14
3 KONEOPPIVIEN MALLIEN KEHITYS .....	16
3.1 Mallin tavoitteiden määrittäminen .....	16
3.2 Piirteiden poiminta .....	17
3.2.1 Dimensionaalisuuden hallinta.....	18
3.2.2 Hyperparametrit .....	20
3.3 Datan ositus .....	20
3.3.1 Yleisiä ositustekniikoita.....	20
3.4 Koneoppivien mallien tyyppejä .....	21
3.4.1 Ohjattu oppiminen .....	21
3.4.2 Ohjaamaton oppiminen.....	22
3.4.3 PuoliOhjattu oppiminen.....	22
3.4.4 Vahvistusoppiminen .....	22
3.5 Algoritmin valinta .....	22
3.6 Mallin koostamisen vaiheiden yhteenveto .....	24
4 ESIMERKKEJÄ KONEOPPIVIEN MALLIEN KÄYTÖSTÄ .....	25
4.1 Yleistä koneoppivien mallien hyödyntämisestä teollisuudessa ja tutkimuksessa .	25
4.2 Mikrorakenteen automatisoitu määrittäminen mikroskooppikuvista.....	25
4.3 Prosessiparametrien optimointi.....	27
4.3.1 Prosessin historiadatan louhinta optimaalisten asetusten löytämiseksi .....	27
4.3.2 Neuroverkko prosessiparametrien ja fyysisten ominaisuuksien välisen yhteyden löytämiseksi.....	28
4.3.3 Koneoppiva prosessiennustus operaattorin tueksi .....	30
4.4 Kohdeominaisuuden parantaminen .....	31

5 YHTEENVETO .....	35
LÄHDELUETTELO	

# 1 JOHDANTO

Motivaatio tämän työn tutkimusaiheeseen on hioutunut vuodesta 2018 alkaen SSAB:n Raahan tehtaan eritasoisissa tehtävissä, joista kehitystyöhön liittyvät projektit olivat saman haasteen kohteena: *Tutkittavat ilmiöt ovat erittäin moniulotteisia, tutkittua ja mitattua tietoa on jo tuotettu enemmän kuin ihminen pystyy käsittelemään ja uuden täsmällisen tiedon tuottaminen on kallista rahallisesti ja ajallisesti.* Vaikka monimutkaisen ilmiön mallintamiseksi olisi kerätty riittävästi dataa, sen löytämien tarpeettoman tiedon joukosta voi olla mahdotonta, jolloin se on tuotettava uudestaan. Kuinka hyödyntää käsittelykykyä suurempi tietomäärä ymmärryskykyä monimutkaisempien ilmiöiden mallintamiseksi? Tämän ongelman ratkaisemiseksi tarvitaan uusia tutkimustyökaluja, joita datajohtoinen tutkimus ja koneoppivat mallit tarjoavat.

Työssä pyritään määrittämään terästeollisuuden ja materiaalitutkimuksen näkökulmista kirjallisuuskatsauksena, *mitä koneoppivat mallit ovat, mitä koneoppivat mallit tarvitsevat toimiakseen, ja mitä koneoppivat mallit pystyvät jo tekemään.* Alun osiossa perehdytään mallintamisen teoreettiseen pohjaan ja datan käsittelyyn, minkä jälkeen tutustutaan käytännön esimerkkeihin jo suoritetuista optimointi, syntesointi ja kategorisointiesimerkeistä. Työssä ei käsitellä tarkempaa matemaattista rakennetta mallien takana tai suoriteta omaa kokeellista tutkimusta dataa mallintamalla ja sen painopiste nojaa datan hallinnan ja käytännön tulosten esittelyyn, sillä ne ovat materiaaliasiantuntijoiden kannalta merkittävämmät osa-alueet.

## 1.1 Terästudkimuksen taustaa

Teräkseen liittyvä teollisuus muodostaa lähes puolet Suomen viennistä (Oulun yliopisto 2020). Ala kohtaa kuitenkin haasteita kiristyneen kilpailun ja ilmastonmuutoksen seurauksena. Esimerkiksi Raahan terästehdas tuottaa noin 7 % suomen kaikista hiilidioksidipäästöistä (Teknologiateollisuus 2020). Haasteet ajavat myös innovaatiota, autoteollisuus on osaltaan pyrkinyt vastaamaan päästöhaasteisiin siirtymällä lujempiin teräksiin ja siten tuonut rahoitusta tutkimus- ja kehitystoimintaan (Fan et al. 2009).

Perinteisesti kehitystyö on noudattanut kaavaa, jossa asiakkaan tarve luo ongelman, johon kehitysorganisaatio pyrkii löytämään ratkaisun. Ongelman ilmiöiden kausaliteettia on selvitetty kontrolloitujen kokeiden tuloksia ja kehittyneitä fysikaalisia malleja yhdistämällä (Agrawal et al. 2014). Esimerkkejä tällaisista malleista tarjoavat muun muassa Nes (1995) ja Galindo-Nava & Rivera-Díaz-del-Castillo (2015)

Fysikaaliset mallit, joita tuotetaan esimerkiksi Gleeble- termomekaanisella simulaattorilla, ovat suhteellisen halpoja, mutta niiden tuottamat empiiriset yhtälöt toimivat vain alueilla, joilla mallilla on dataa. Ilmiöt esimerkiksi mikrorakenteen kehittymisen takana ovat niin monimutkaiset, ettei niitä kyetä vielä teoreettisesti mallintamaan riittävällä skaalalla. (Karjalainen & Larkiola 2020) Monen täsmällisen tutkimusongelman ratkaisuun onkin tehtävä omat uudet kokeet ja niiden pohjalta mallit, jotka toimivat vain kyseiseen tapaukseen. Paine sijoittajien ja rahoittajien toimesta saavuttaa tuloksia lyhyemmällä aikajänteellä lisää tarvetta uusien tehokkaampien tutkimusmetodien, kuten koneoppivien mallien, käyttöön. (Correa-Baena et al. 2018) Nämä mallit voivat tarjota myös vaihtoehdon yrityksen ja erehdyksen kautta kokeiluille (Raccuglia et al. 2016). Myöskin olemassa olevan datan hyödyntäminen ilman automatisaatiota, on jo itsessään mahdoton tehtävä. Koneoppiva mallinnus näkyy jo EU-rahoitteisten projektien kuten Model-based optimisation for efficient use of resources and energy ja useiden Horizon Europe hankkeiden kuvauksissa, jotka sisältävät suoria viittauksia koneoppivien mallien kehitykseen (A.SPIRE 2020; European Commission 2022).

Viime vuosina suurten tietokantojen määrä ja tietokoneiden kyky käsitellä ja varastoida dataa on lisääntynyt huomattavasti (Schmidt et al. 2019). Tämä on johtanut voimakkaaseen nousuun koneoppimisen hyödyntämisessä, kehittänyt koneoppimisen algoritmeja entisestään sekä laajentanut niiden käyttökohteita. Muilla tutkimusaloilla, kuten biologiassa ja kemiassa, koneoppivien mallien käyttö tutkimus- ja kehitystyössä on jo kypsempää verrattuna materiaalitutkimukseen (Himanen 2020) ja kaupallisilla toimijoilla vähittäismyynnistä tietopalveluihin on otettu käyttöön datan louhinta koneoppivien mallein (Agrawal et al. 2014). Oletettu käytännön esimerkki kaupallisen toiminnan sovellutuksista on tämän kandidaatintyön hakusanojen perusteella tarjottu kohdennettu mainonta ohjelmistokehityksen rekrytointi-ilmoituksista ja muista koneoppimiseen liittyviä tuotteista.

## 2 KONEOPPIVAT MALLIT

Erityisen potentiaalisen kohteen koneoppiville malleille tarjoaa teollisuuden, kuten terästehtaan, tuottama jatkuva prosessidatan virta. Nykyaikaisessa tuotantolaitoksessa lähes jokaisesta prosessisäädöstä ja laitteita ohjaavista mittauksista jää merkintä tietokantaan, josta voi etsiä yhteyksiä haluttujen ilmiöiden ja valmistusparametrien välillä. Esimerkiksi terästeollisuudessa yleiset toimitusehtostandardit kuten SFS-EN 10025-1-6:2019 vaativat SFS-EN 10168: 2004 mukaisen ainestodistuksen, joka sisältää kemiallisen koostumuksen ja useita mekaanisia ominaisuuksia (Metalliteollisuuden Standardintyöryhmä ry 2004; Suomen Standardisoimisliitto SFS ry 2019). Yhdistettynä julkisiin tietokantoihin ja lähteisiin, tehtaiden data loisi suuren kirjaston materiaalitietoutta uusien löydösten tekemiseen, koneoppivien mallien ja ilman.

### 2.1 Mitä koneoppiminen on?

Koneoppimiselle ei ole yhtä tarkkaa määritelmää ja aihetta ympäröivä noste hämärtää siihen laskettavien käsitteiden joukkoa. Oman toiminnan kuvausta osana trendikästä teknologista suuntausta voidaan pitää kilpailuetuna, mistä on seurannut, että koneoppimiseen kuulumattomia tekniikoita on esitetty koneoppivina. Yksinkertaisimmillaan koneoppivat mallit voivat tuottaa lineaarisia sovituksia, mutta se ei ole niiden vahvuuksien hyödyntämistä (Schmidt et al. 2019). Koska koneoppimisen määritelmän muodostamiseen ei riitä mitä mallit tuottavat, on siihen lisättävä olennaisena osana tuottamisen tapa. Esimerkiksi Pyle (1999) toteaa koneoppivien mallien eron perinteisiin tilastollisiin menetelmiin nähden olevan, että yhden hypoteesin paikkansapitävyyden sijasta koneoppiva malli testaa kaikki mahdolliset hypoteesit.

Alpaydi (2014) kertoo koneoppivien algoritmien optimoivan määrättyjen tehtävien suorittamista esimerkkien ja aikaisempien kokemusten perusteella. Väitöskirjassaan Himanen (2020) käyttää Mitchellin (1997) määritelmää koneoppimisesta tietojenkäsittelytieteiden alahaarana, jonka ohjelmat muokkaavat itseään paremmaksi kokemuksensa pohjalta. Katsauksessaan Schmidt ja muut (2019) toteavat koneoppivien mallien tunnistavan yhteyksiä ja löytävän kaavoja ominaisuuksien ja piirteiden [feature/descriptor] välillä tehokkaammin kuin ihmiset. Domingos (2012) pitääkin



automatisaatiota tulosten tuottamisessa koneoppivien mallien houkuttelevimpana ominaisuutena verrattuna ihmisten suorittamaan manuaaliseen tutkimukseen. Lisäksi Domingos (2012) erottaa koneoppiville malleille tärkeäksi tavoitteeksi kyvyn yleistää mallinnuksensa tuloksia syötettyjen datapisteiden ulkopuolelle.

Tässä työssä muodostetaan yllä mainittuja esimerkkejä yhdistävistä tekijöistä koneoppivien mallien määritelmäksi malli, jossa on automaattista datan käsittelyä ja käsittelyn muokkausta oppimisen seurauksena, haluttujen ominaisuuksien ja piirteiden yhdistäminen sekä ekstrapolointi käytetyn datan ulkopuolelle moniulotteistenkin [high-dimensional] ilmiöiden kohdalla.

## 2.2 Data mallien pohjana

Koneoppivat mallit eivät kykene luomaan tietoa tyhjästä, vaan niiden tehokkuus on hyvin riippuvainen datasta, joiden pohjalta ne oppivat (Domingos 2012). Datan muokkauksen tavoitteena on selvittää, mikä erilaisista tavoista kuvata lähtödata on mallin kannalta helpoin opittava ja saattaa se sellaiseen muotoon. Tätä datan piirteiden muokkausta mahdollisimman koneluettavaan muotoon kutsutaan piirteiden poiminnaksi [Feature engineering]. Olemassa olevissa materiaalikirjastoissa on myös valmiita, voimakkaasti korreloiviksi tunnettuja piirrepaketteja, joita voi hyödyntää oppimisen pohjana. (Himanen et al. 2020)

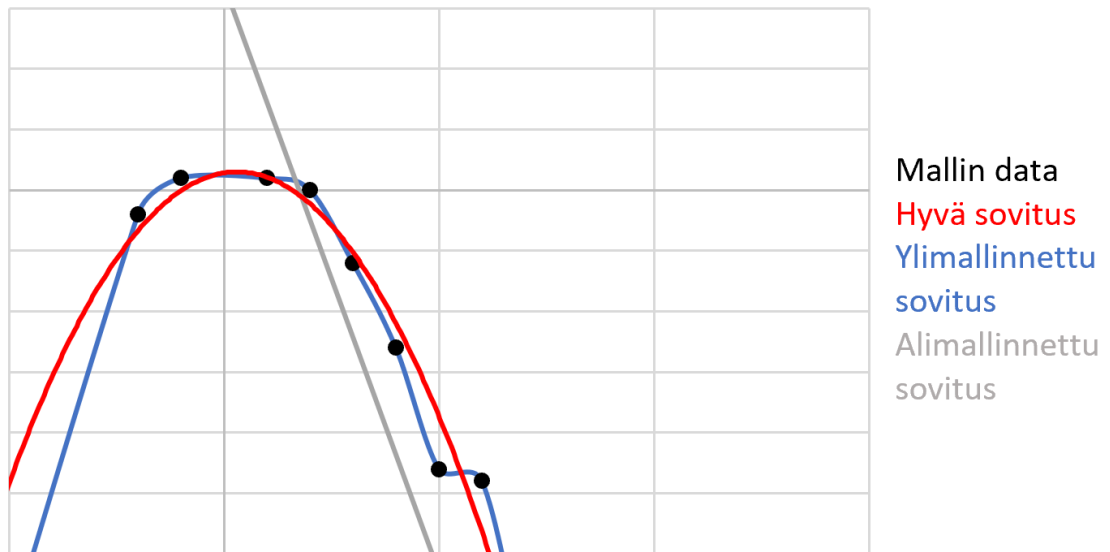
Datan siivoaminen ja muu käsittely, kuten luokittelu ja normalisointi on usein mallinnusprosessin työläin vaihe (Schmidt et al. 2019), ja mahdollistaa materiaalitutkijoiden substanssiosaamisen yhdistämisen tietojenkäsittely- ja ohjelmointitieteisiin. Itse opetusvaihe, jossa algoritmit käsittelevät dataa ei ole yleensä yhtä aikaa vievää (Pyle, 1999): On nopeampaa käyttää konetta kuin rakentaa sellainen. Vanhemmissa 90-luvun lähteissä havaitaan myös matalamman laskentatehon ja alemman muistikapasiteetin tuottamat rajoitteet verrattuna nykytietokoneisiin (Chen et al. 1996; Westphal & Blaxton 1998; Pyle 1999), mikä on osaltaan saattanut vaikuttaa datan käsittelyn painotuksiin verrattuna nykyaikaiseen lähestymistapaan.

### 2.2.1 Datan määrä ja laatu

Tunnettu lausahdus roskaa sisään, roskaa ulos pätee myös osaltaan koneoppiviin malleihin ja vaikuttaa niiden kykyyn tuottaa laadukkaita tuloksia (Domingos 2012). Aikaisempi esimerkki kohdennetusta mainonnasta kuvastaa osittain tätä datan haastetta. Jos ohjelmistokehittäjien hakutuloksia on käytetty rekrytoinnin kohdentamisen pohjana, saatetaan päätyä palkkaamaan vain kopioita aikaisemmista työntekijöistä. Kyseiseen ilmiöön havahduttiin Amazonilla, jossa naishakijoita arvotettiin matalammalle, sillä he poikkesivat opetusdatan mukaisista aikaisemmista rekrytoinneista, miehistä (Dastin 2018). Materiaalitekniikan saralla tämä ongelma voidaan nähdä kapea-alaisena lähtödatana, joka voi rajoittaa mallinnuksen tuloksen inkrementaalisiin parannuksiin suurten edistysaskeleiden sijaan (Shin et al. 2019). Toisin sanottuna, jos halutaan kehittää jotain kategorisesti uutta, ei sen etsimistä voida rajoittaa vain aikaisemmin kokeiltuihin tapauksiin.

Dataa on oltava riittävästi ja sen on oltava riittävän monipuolista, jotta se voi kuvata monimutkaisia ilmiöitä (Bostanabad et al. 2018) ja välttää kapea-alaisen datan rajoitteet. Esimerkiksi teräksen fyysisten ominaisuuksien ennustamisessa mikrorakenteen mallintaminen on ollut yleinen lähestymistapa, sillä niiden välinen yhteys on osoitettu vahvoin fenomenologisin perustein. (Raabe 2015) Mallintaminen on keskittynyt selittämään ja ennustamaan materiaalien ominaisuuksia pohjautuen perustavanlaatuisen fysiikkaan, termodynamiikkaan ja reaktiokinetiikkaan, joka johtaa erityyppisiin mikrorakenteisiin. (Chen & Gu 2015) Datan määrä tässä tilanteessa voi olla suuri, jos malliin syötetään esimerkiksi miljoonia eri jäähtymisnopeuksia ja niihin liittyviä mikrorakenteita piirteinä. Tämä data ei kuitenkaan olisi riittävän monipuolista mikrorakenteen muodostumisen kuvaamiseen, vaan sen lisäksi tarvittaisiin ainakin koostumuksellista dataa ja lukuisia muita piirteitä. Liian vähin piirtein mallintaminen johtaa koneoppimiselle tyypilliseen ongelmaan, ylimallinnukseen (Domingos 2012), Kaavio 1. Ylimallinnettu simulointi opettelee lähtödatansa ja olettaa kaiken muun datan olevan samanlaista. Se on myös varianssilta suurempaa kuin hyvin sovitettu malli (Domingos 2012). Käytännön esimerkki tästä olisi ostaa kaikki mahdolliset lottokuponit ja todeta kyseisen arvonnän voittavan numeron valitsemisen olevan kaava loton voittamiseen, vaikka todellisuudessa on tehty vain satunnainen arvaus.

## Mallinnettu tulos



**Kaavio 1. Esimerkki ylimallinnetusta sovituksesta (sinisellä) verrattuna paremmin yleistävään sovitukseen (punaisella) ja alimallinnettuun sovitukseen (harmaalla), jäljitellen (Himanen 2020)**

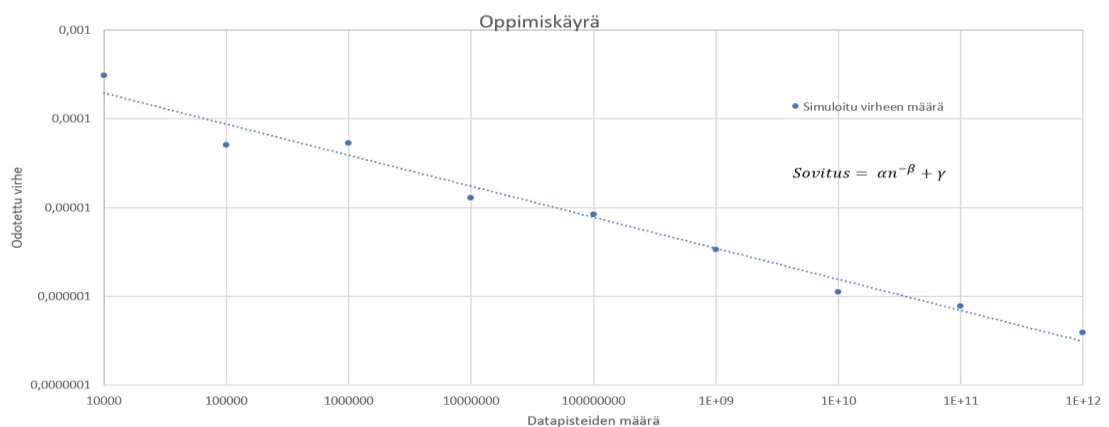
Piirteiden määrän lisääminen ei kuitenkaan automaattisesti johda parempaan mallinnustulokseen, vaan siitä voi seurata dimensionaalisuuden ongelma [Curse of Dimensionality] (Pyle 1999; Domingos 2012; Himanen 2020). Dimensionaalisuudella tarkoitetaan koneoppimisessa eri piirteiden lukumäärää, ja niiden muodostama permutaatioiden kasvu johtaa dimensionaalisuuden ongelmaan (Domingos 2012). Hypoteettisesti ajateltuna, jos piirre vaikuttaisi kategorisesti ominaisuuteen on tai ei -periaatteella, piirteiden määrää lisäämällä saataisiin  $2^n$  permutaatiota, jossa  $n$  on piirteiden lukumäärä. Dimensionaalisuuden  $n$  kasvaessa suureksi, mikään tietokanta ei sisällä riittävästi datapisteitä, että saataisiin satunnaista arvausta varmempi vastaus selittämään ilmiötä. Merkittävät ilmiöt saattavat myös hukkoa turhan datan aiheuttamaan kohinaan, jossa monen piirteen pienien vaikutusten summa piilottaa merkittävimmät tekijät allensa (Westphal & Blaxton 1998).

Liian suuri datamäärä lisää myös mallin vaatimia prosessointiresursseja. Himanen (2020) esittää optimaalisen datamäärän määrittämiseen ratkaisuksi eräänlaista oppimiskäyräperiaatetta, jossa datapisteiden määrä ja odotettu mallinnusvirhe

noudattavat potenssilakista kaavaa. Kaava muodostaa lineaarisen kuvaajan logaritmisella asteikolla, josta haluttuun tarkkuuteen vaadittava datamäärä voidaan lukea kyseiselle mallille, Kaavio 2. Oppimiskäyrän yleinen kaava on muotoa (1),

$$\text{Virheen sovitus} = an^{-\beta} + \gamma \quad (1)$$

missä  $\alpha$ ,  $\beta$  ja  $\gamma$  ovat mallin parametreja ja  $n$  on datapisteiden lukumäärä.



**Kaavio 2. Himasen (Himänen 2020) mukainen oppimiskäyrä. Sovite noudattaa kaavaa (1). Simuloitu data ei perustu todellisiin malleihin, mutta vastaa tyypillistä tulosta.**

On kuitenkin hyvä huomata, että datan määrän lisäys voi lisätä mallin yleistyskykyä, vaikka sen tarkkuus ei parani (Shen, et al., 2019).

## 2.3 Datan lähteitä

Nykyään tietokoneet tuottavat enemmän dataa kuin empiiriset kokeet (Correa-Baena et al. 2018; Himanen 2020). Uuden datan tuottaminen on osaltaan itseään ruokkiva sykli mahdollistaen yhä uuden, laadukkaamman datan luonnin, myös koneoppivien mallein. (Hart, et al. 2021) Koneoppimista voidaan käyttää myös datan yhdistämiseen monesta lähteestä, tai yhtenäistämiseen siten, että samaa mallia voidaan käyttää monelle eri tietokannalle (Pan & Yang 2010). Tietokoneella tuotettu data ei ole kuitenkaan

samanlaista kuin empiiristen kokeiden. Esimerkiksi tietokoneilla tuotetun datan varianssi on yleensä tasaista ja mahdollinen virhe on luonteeltaan systemaattisempaa. Empiirisiin kokeisiin sisältyy laajempi satunnaisen virheen osuus, jota on vaikeampi määrittää. (Himanen 2020) Koneoppivien mallien kannalta on oleellista keskittyä datan laatuun, sen painottumisen ja jakauman osalta. Jakauman tunteminen on tärkeää, sillä koneoppivat mallit tarvitsevat usein vakiokokoisien syöttödatan (Himanen et al. 2020). Esimerkiksi Gaussisen regression prosessimallit [Gaussian Process Regression] pohjautuvat oletukseen, että datan tuottanut prosessi noudattaa Gaussista jakaumaa. (Schmidt et al. 2019)

Mallintajalla saattaa olla myös halu yhdistää dataa useista lähteistä ja on loogista pyrkiä hyödyntämään muiden tekemä aikaisempi työ (Jain et al. 2013). Useasta lähteestä haettu data tuo mukanaan omat haasteensa yhtenevien datastandardien puutteen vuoksi. Dataa on montaa eri tyyppiä, ja sen määritelytapa voi tehostaa tai heikentää koneoppivien mallien prosessointia. Datan luokittelu ja nimeäminen ei ole yksiselitteinen prosessi varsinkaan rakenteellisen [Structured], kuten luokiteltu numeerinen data, ulkopuolella. Kuvien, kuten mikrorakenteen mikroskooppikuvat, rakennetta ei ole määritelty yhteisen standardin mukaan ja niitä voidaan pitää usein luokittelemattomina [Unstructured]. Miten data on luokiteltu, mitä ominaisuuksia siihen on yhdistetty tiedon ja metadatan, kuten yksiköt, osalta vaikuttavat millainen algoritmi soveltuu sen opetteluun. (Westphal & Blaxton 1998; Himanen 2020)

Koneoppimisen kannalta hyvät piirteet ovat toisistaan riippumattomia ja korreloivat voimakkaasti tutkittavan ilmiön kanssa (Schmidt et al. 2019). Useiden lähteiden hyödyntämisen työllisyyden lisäksi aiheutetaan riskiä lähteiden vertailukelpoisuuden osalta. Vaikka data normalisoidisiin ja jäsenneltäisiin samoihin hierarkioihin ja kuvaajiin [Label], eri laboratorioissa tuotetuilla mittalaitteilla on eri systemaattiset ja satunnaiset virheet (Chong et al. 2007). Jos datan käsittelijällä ei ole ymmärrystä käyttämänsä datan laadusta, voi se aiheuttaa ylimallinnusta tai suurentaa hajontaa (Domingos 2012). Esimerkiksi standardi SFS-EN ISO 6272:2011 (Suomen Standardisoimisliitto SFS ry 2012) sisältää varoituksen kyseisen kuulaiskukokeen datan olevan vertailukelpoinen vain laboratorion sisällä, jolloin kyseisen standardin pinnoitteiden iskunkestävyysdatan yhdistäminen useista lähteistä johtaisi virheelliseen mallinnukseen.

Haasteena ovat myös subjektiiviset analyysit tuotetun datan taustalla. Esimerkiksi lineaarisen leikkausvälin määritelmä voi arvioijasta riippuen, varsinkin anisotrooppisten ja nauhoittuneiden terästen kohdalla, johtaa eri raekokomääritelmiin samalle näytteelle.

Prosessiteollisuuden dataa ei ole tuotettu mallinnusmielessä, joten se sisältää poikkeavia ja virheellisiä mittausarvoja. Vaikka kaikki data olisi tuotettu samassa tehtaassa, esimerkiksi aihion pinnan infrapunalämpömittauksen vaikuttaa epäsäännöllinen hilsekerros, jonka vaikutusta on vaikea arvioida ja hajontaa muun datan osana vaikea määritellä. Prosessidatan jakauman ei voida myöskään olettaa olevan vakio. Prosessista poistetaan epäonnistuneet ääripäät aikaisessa vaiheessa, jolloin lopullisista tuloksista suodattuu pois toinen ääripää. Ehkä suurimman ongelman muodostaa prosessivaiheiden riippuvuus toisistaan, mikä näkyy mitattujen suureiden riippuvuutena toisistaan, jolloin niiden käyttäminen piirteinä johtaa epätarkkuuteen päällekkäisyyksien vuoksi. (Chong et al. 2007)

### **2.3.1 Tulevaisuuden dataprosessi**

Standardien puute vaikeuttaa tietokantojen ja julkisten materiaalipankkien, kuten Materials Genome Projectin, yhdistämistä. (Correa-Baena et al. 2018) Kilpailtu tutkimusrahoitus voi tulevaisuudessa muodostaa merkittävän standardisoinnin ajajan, ja Himasen (2020) mukaan EU lukuisten muiden julkisten instituutioiden ohella vaatii tutkimusdatan hallintasuunnitelmaa rahoittamissaan uusissa hankkeissa. Correa-Baena (2018) esittää vision pilvipalvelumaisesta suuren läpäisyn koejärjestelystä, jossa keskitetyt laboratoriot tuottavat suuren määrän dataa kaikkien käytettäväksi eri puolilta maailmaa sijaitsevien tutkijoiden ohjaamana. Tällainen supertietokonemainen resurssien keskittämien johtaisi myös tuotetun datan yhtenäistymiseen.

Nykyään on havahduttu kaiken datan arvokkuuteen, myös epäonnistuneiden kokeiden osalta (Domingos 2012). Koneoppivat mallit tarvitsevat myös dataa epäonnistuneista ja toimimattomista ilmiöistä. (Schmidt et al. 2019) Esimerkki tällaisesta lähestymistavasta on Raccuglian tutkimusryhmän (2016) koe, jossa luotiin uusia onnistuneita yhdisteiden syntesointeja koneoppivien mallien pohjalta, käyttäen pohjadataa kertyneiden epäonnistuneiden kokeiden tuloksia. Tutkimuksessa onnistumista lähestyttiin poikkeavasti epäonnistumisen rajapinnan kautta. Tuloksena saatiin hieman kokeneen

kemistin intuitioon verrattuna parempia yhdisteitä (Raccuglia et al. 2016). Tulosta yleistettäessä täytyy kuitenkin olla varovainen, ettei luo huonointa mahdollista versiota onnistumisesta.

Tiedon tuottamisen rahoittamiseen liittyy myös mielenkiintoinen metatieteellinen pohdinta muutoksesta rohkeampaan ja tulosten kannalta epävarmempaan tutkimuskäytäntöön laajan dataskaalan tuottamiseksi. Askel datarikkaaseen ajattelumaailmaan, jossa myös epäonnistuneita ja vähemmän hohdokkaita tuloksia julkaistaan, jotta niiden toistolta vältytään, voi tulla koneoppivan mallinnuksen datantarpeen muodossa. (Correa-Baena et al. 2018) Psykologian tutkimuksessa on jo tarkasteltu julkaisujen hyväksyntää laadukkaan tutkimussuunnitelman pohjalta riippumatta tuloksista Nosekin johtaman laajan selvityksen johdosta, jossa monia aikaisempien julkaisujen tuloksia ei pystytty toistamaan uusintakokeissa (Open Science Collaborartion 2015; Weir 2015). Samankaltainen tieteellisten arvojen uudelleentarkastelu saattaa olla edessä myös materiaalitutkimuksen saralla. Mallien lähtödatan epäneutraali tai epärealistista tilannetta kuvaava jakauma saattaa johtaa tilastollisesti merkittäviin tuloksiin, vaikka ne olisivat virheellisiä. Ennen koneoppivien mallien tulosten juhlimista Domingos (2012) muistuttaa koneoppivien mallien tunnistavan pääasiassa korrelaatiota, joten niiden olettaminen kausaaliseksi voi olla riskialtista.

### 3 KONEOPPIVIEN MALLIEN KEHITYS

Koska koneoppivien mallien potentiaali on niin houkutteleva, on niitä pyritty soveltamaan monen erityyppisen ongelman ratkaisuun. Erilaiset tehtävät vaativat erilaiset algoritmit ja toimintaperiaatteet pysyen kuitenkin koneoppimisen yläkäsitteen alla. (Domingos 2012) Koneoppivan malli on hyvä konfiguroida yhdessä datan käsittelyn kanssa (Himanen 2020), jolloin saadaan myös käsitystä siitä, millaisia tulosodotuksia voidaan pitää realistisina (Pyle 1999).

#### 3.1 Mallin tavoitteiden määrittäminen

Koneoppivien mallien koonti on riippuvainen siitä, mitä tavoitellaan: Halutaanko tarkkoja tuloksia, vai onko todennäköisyshajumaan perustuva tulos riittävä? Tiedetäänkö, millainen ilmiö on kyseessä, vai lähdetäänkö etsimään tuntematonta yhteyttä lähtötilanteen ja lopputuotteen välillä? Halutaanko saada lisää tietoa prosessien taustailmiöistä vai pelkästään parempi tulos välttämättä ymmärtämättä mihin se pohjautuu? Niin sanottu suljettu [Black Box] malli ei avaa käyttäjälleen, kuinka se muodostaa tuloksen, vastakohtanaan avoin [White Box], joka kertoo kaavan ilmiön taustalla (Schmidt et al. 2019). Ghiringhelli (2015) toteaa, että mallin luotettavuus on aina kyseenalainen ja mahdollinen tieteellinen arvo vähäinen sen piirteiden ja ilmiön välisen yhteyden jäädessä mysteeriksi. Tuloksen luotettavuutta voidaan validoida testaamalla mallia datalla, jota se ei ole aikaisemmin käyttänyt ja vertaamalla sen tulosta aikaisempiin vastaaviin (Agrawal et al. 2014).

Tavoitteiden lisäksi malliin käytössä olevat resurssit vaikuttavat sen suunnittelufilosofiaan. Esimerkiksi tuotannonohjauksen reaaliaikaisen [online] laskennan on oltava nopeaa, mikä asettaa aikarajoitteita mallin prosessoinnille. Mallin tarkkuudesta voidaan luopua suuremman nopeuden saavuttamiseksi (Belisle et al. 2015). Myös käytettävissä olevat tietokannat ja niiden sisältämien datapisteiden laatu vaikuttaa valittavaan mallinnustapaan.

Jos ollaan valmiita hyväksymään erinäisiä epävarmuuksia lopputulosten suhtaan, avautuu uusia keinoja datan ulottuvuuksien lisäämiseen. Induktiivinen oppiminen, jossa johdetaan



mallissa opittuja sääntöjä sen datan ulkopuolelle sisältää aina riskin verrattuna deduktiiviseen oppimiseen, jossa sääntöjä luodaan vain mallin datan sisälle. (Domingos 2012). Yhdistämällä eri alojen osaajia on varmistettava, että kaikki pyrkivät ratkaisemaan saman ongelman (Pyle 1999) ja että ongelma on ylipäänsä ratkaistavissa. Vaikka ilmiötä pystyttäisiin kuvaamaan jonkin funktion muodossa, se ei tarkoita, että funktiota on mahdollista oppia (Domingos 2012). Esimerkiksi mikrorakenteessa raekoon jakauma (Bostanabad et al. 2018) tai martensiitin muodostuminen (Porter & Easterling 1992 s. 383) ovat hyvin satunnaisuuden ohjaamia ilmiöitä: Onko mahdollista luoda tietokanta, joka pystyisi kattamaan täysin satunnaisen ilmiön kaikki olennaiset piirteet?

### 3.2 Piirteiden poiminta

Kun tavoite on selvä, mallien rakennus aloitetaan yleensä datan keräämisellä ja tietokannan luomisella, mikä on riittävän suuri ja monipuolinen kuvaamaan tutkittavan ilmiön tekijät eli piirteet. Eräs materiaalitekhninen lähestymiskulma on yhdistää materiaalitieteiden substanssiosaaminen tietojenkäsittely- ja ohjelmistotieteisiin esittämällä piirteiden poimintaprosessiin valistuneita arvauksia, mitkä piirteet parhaiten kuvaavat selvitettäviä ilmiöitä (Ghiringhelli et al. 2015).

Pimentoon jääneen prosessoinnin selvittämiseksi on piirteiden poiminnan lisäksi niiden oppiminen [Feature Learnign] on oma suuntauksensa, jossa dataa ja sen piirteitä arvioidaan niiden vaikuttavuuden perusteella (Himanen et al. 2020). Esimerkiksi Raccuglian tiimin (2016) tutkimuksessa tulokset tuottanut koneoppiva malli käydään läpi uudella koneoppivalla mallilla sen toimintaperiaatteiden selvittämiseksi.

Piirteiden poimintaa havainnollistavan hypoteettisen ilmiön  $f$  voidaan ajatella noudattavan kaavaa muotoa (2)

$$f = Ax^a + Bx^b \dots Wx^w \quad (2)$$

missä  $f$  on kuvattu ilmiö,  
 $x$  on muuttuja,  
 suuret kirjaimet  $A, B, \dots W$  ovat hypoteettisia vakiokertoimia ja  
 pienet kirjaimet  $a, b, \dots w$  ovat hypoteettisia potenssivakioita.

Pienten kirjainten potenssivakioilla on suurempi vaikutus ilmiön  $f$  tulokseen kuin vastaavilla suurten kirjainten kertoimien arvoilla. Lisäksi ääriarvot tuottavat suuremman efektin kuin 1 lähellä olevat arvot. Mallinnuksessa on hyödyllisempää etsiä kaavan (2) potenssivakioita vastaavat piirteet ja niistä suurimman vaikutuksen aiheuttavat ääriarvot verrattuna vakiokertoimiin, sillä ne vaikuttavat mallinnettavaan ilmiöön kaikista voimakkaimmin. Pelkästään tieto piirteistä, jotka ovat merkityksellisimpiä ilmiön kannalta, on itsessään arvokas materiaalitutkimuksen ja kehitystyön kannalta ohjaten painotusta tuleville tutkimuksille. Tällainen malli ei kuitenkaan vastaa teollisuuden tulos pohjaiseen tarpeeseen yksiselitteisellä ratkaisulla, vaan osoittaa suuntaa mistä sellainen saattaa löytyä.

Piirteiden valinnassa niiden paremmuutta voidaan arvioida monin keinoin regressiomalleista neuroverkkoihin asti. Yksi suure, jolla piirteen hyvyttä voi arvioida, on kuinka paljon tietoa se lisää malliin (Himanen et al. 2020). Hyvän lähtökohdan piirteiden valinnalle tuo asiantuntijoiden substanssiosaaminen ja fysiikan lainalaisuudet, joille tutkittavat ilmiöt pohjautuvat. Hyviksi tunnettujen piirteiden toimivuus voidaan varmistaa ja piilevien piirteiden olemassaolo havaita korrelaatioanalyseillä. (Shin et al. 2019)

Piirteiden ja ominaisuuksien välisellä korrelaatiolla on myös eroja. Yksi tapa havainnollistaa asiaa on kuvata piirteitä ja niistä nousevia ominaisuuksia ketjuna. Esimerkiksi prosessiparametrien ja terästuotteen ominaisuuksien välille pystytään luomaan malli, mutta niiden selittävä tekijä, mikrorakenne, linkittävänä piirteenä todennäköisesti vähentäisi mallin datantarvetta ja monimutkaisuutta tehden siitä läpinäkyvämmän. On edullisempaa löytää suoran yhteyden, kuin välillisen vaikutuksen piirteitä (Shen et al. 2019)

### **3.2.1 Dimensionaalisuuden hallinta**

Kappaleessa 2.2.1 mainittu dimensionaalisuuden ongelma ohjaa minimoimaan piirteet siihen vähimmäismäärään, joka kykenee kuvaamaan tutkittavan ilmiön riittäväällä tarkkuudella. Ouyang ja kumppanit (2018) on kehittänyt erään ratkaisun piirteiden minimointiin algoritmillä nimeltään SISO [Sure Independent Screening and Sparsifying Operator]. SISO muodostaa analyttisiä ratkaisuja piirteiden ja ominaisuuksien välillä,

jos sellainen ratkaisu on olemassa, tai tarkimman mahdollisen yhteyden piirteen ja ominaisuuden välille, mikäli tarkkaa vastausta ei ole olemassa kyseisen datajoukon perusteella. (Ouyang et al. 2018) Algoritmi on osoitettu toimivaksi eristeiden ja johteiden erottelussa, joka on esimerkki koostumuseroista herkälle ilmiölle. SISSO:n käyttöä rajoittaa kuitenkin sen suuri muistin tarve datajoukon kasvaessa (Ouyang et al. 2018), eikä kyseistä algoritmia ole kattavasti sovellettu teräksen kaltaisiin monimutkaisiin rakenteisiin piirteiden ja ominaisuuksien takana (Shen et al. 2019). Muita algoritmeja, joilla optimoida dimensionaalisuutta, ovat mm., Matching Pursuit, Orthogonal Matching Pursuit ja LASSO [Least Absolute Shrinkage and Selection Operator] (Ouyang et al. 2018), joka esiintyy myöhemmin kappaleessa 4.3.3 Baen tiimin (2021) tutkimuksessa

Paraskaan piirteiden poiminnassa saatu joukko ei välttämättä ole riittävä. Jos lineaarisen suhteen muodostavilla piirteillä pyritään kuvaamaan korkeamman asteen ilmiötä, on piirteiden dimensionaalisuutta lisättävä alimallinnuksen välttämiseksi. (Schmidt et al. 2019) Dimensionaalisuutta voidaan lisätä piirteiden lukumäärää kasvattamalla, tarjoten asiantuntijoille mahdollisuuden datajoukon kehittämiseksi merkittävillä piirteillä (Shen et al. 2019), mikä saattaa ratkaista alimallinnuksen ongelman (Schmidt et al. 2019). Uusien korreloivien piirteiden tuottaminen täydentämään dimensionaalisuutta voi olla kallista, mutta asiantuntijat osaavat kohdistaa niiden tuottoa kustannustehokkaisiin ratkaisuihin. Terästudkimuksessa myös luotettavien simulointiohjelmien avulla voidaan tuottaa dataa faasimuutoksista ja mikrorakenteesta, mitä lisätä esimerkiksi mekaanisiin ominaisuuksiin painottuvaan dataan. (Shen et al. 2019)

Toinen tekniikka on lisätä olemassa olevien datapisteiden dimensionaalisuutta. Esimerkiksi regressiomalleissa muunnosfunktiolla piirteen astetta voidaan nostaa ja yhdistää piirteitä korkeamman asteen avaruudeksi käyttäen hyväksi ydinfunktioita [Kernel]. Tällöin valitun ratkaisultaan yksinkertaisemman ydinfunktion tarkastelu riittää koko piirreavaruuden läpikäynnin sijaan. (Schmidt et al. 2019; Himanen 2020) Väitöskirjassaan Himanen (2020) tarjoaa tarkemman matemaattisen kuvauksen eri ydinfunktioista ja niiden käytöstä piirteiden dimensionaalisuuden nostossa.

### 3.2.2 Hyperparametrit

Hyperparametrit ovat algoritmiin lisättyjä keinotekoisia muuttujia, jotka muokkaavat mallin monimutkaisuutta, oppimista ja ominaisuuksia (Schmidt et al. 2019). Hyperparametri voi olla esimerkiksi kerroin jonkin algoritmin osan tai piirteen painottamiseksi (Himanen, 2020). Algoritmeja voidaan optimoida ja niiden tarkkuutta parantaa muokkaamalla hyperparametrejä (Agrawal et al. 2014). Hyperparametrit eivät kuitenkaan itse optimoidu mallin sisäisten funktioiden seurauksena, vaan se on tehtävä erillisenä prosessina. (Himanen 2020) Parametrien muokkaus onkin yksi tärkeimpiä osuuksia mallinnuksen onnistumisen kannalta ja muokkauksen optimointi on usein validoitava mallin tulosten tapaan erillisillä datan osituksilla, joilla varmistetaan parhaiden mahdollisten säätöjen löytyminen (Domingos, 2012). Esimerkki tällaisesta prosessista esitellään kappaleessa 4.4.

## 3.3 Datan ositus

Jotta tuloksien epävarmuutta voidaan pienentää induktiivisten ja Black Box -mallien osalta, on ne validoitava datalla, jota malli ei ole ennen nähnyt. (Agrawal, et al., 2014) Datatietokannan luomisen ja suodatuksen jälkeen on se jaettava opetus ja testi osiin, kuten todetaan monissa aiheen ympärillä käytetyissä lähteissä (Westphal & Blaxton 1998; Pyle 1999; Chong et al. 2007; Agrawal et al. 2014; Belisle et al. 2015; Schmidt et al. 2019; Shen et al. 2019; Shin et al. 2019; Himanen 2020; Himanen et al. 2020) Datan määrä ja laatu vaikuttavat sen osituksen lopputulokseen: piirteet voivat jakautua epäedullisesti, jos ne ovat keskittyneet piirreavaruuden tiettyihin osiin (Shen et al. 2019). Datan rajallinen määrä saattaa myös ohjata ositusta. Jos datan määrän lisääminen parantaa mallin suorituskykyä, voi sen rajaaminen opetuksen ulkopuolelle validointitarkoituksissa olla haitallista (Domingos 2012; Shen et al. 2019).

### 3.3.1 Yleisiä ositustekniikoita

Datan ositukseen on useita tekniikoita mistä valita mallinnusresurssien mukaan sopiva. Yksinkertainen ositus on jakaa data kahteen satunnaiseen puolikkaaseen [2-Fold Cross Validation], joista toisesta tehdään opetus- ja toisesta testijoukko. Tämä ositus voidaan yleistää k-jakoon [K-Fold Cross Validation], jossa data jaetaan k-lukumäärään satunnaisia osia. K-jaossa K-1 osaa käytetään opetukseen ja yhtä testaukseen. Jakoa

vaihdetaan  $k$  kertaa, jolloin koko piirreavaruus katetaan mallinnuksessa. Haasteeksi muodostuu  $k$  määrän eri malleja koostaminen, joka vaatii paljon resursseja. Jos datan määrä on pieni, saatetaan käyttää validointia, jossa  $k$ -jaon  $k$  vastaa instanssien määrää [Leave-One-Out Cross Validation]. (Agrawal et al. 2014) Useiden ositusten tulosten keskiarvosta saadaan muodostettua kuva mallin kokonaishyvydestä (Shen et al. 2019; Shin et al. 2019).

Eri jakotavoista voidaan päätellä ositusmäärän lisäämisen lisäävän tarvittavan laskentaresurssin kasvavan voimakkaasti datan ja jakojen määrän kasvaessa. Ositusten vaikutusta voidaan myös arvioida testaamalla mallin tulosten hyvyttä osituksia muuttamalla, hieman kuten parametrien ja algoritmien paremmuuden suhteen ja vertailemalla tuloksia esimerkiksi regressiomallein. (Shen, et al., 2019)

### **3.4 Koneoppivien mallien tyyppejä**

Koneoppivien mallien jakoon on monta kategoriaa. Yksi yleisimmistä tavoista on jakaa ne ohjattuun oppimiseen [Supervised Learning], ohjaamattomaan oppimiseen [Unsupervised Learning], sekä vahvistusoppimiseen [Reinforcement learning] niiden käyttämän datan laadun perusteella (Schmidt et al. 2019). Lisäksi on olemassa ohjatun ja ohjaamattoman välimuoto, puoliohjattu oppiminen [Semi-Supervised Learning] (Nguyen et al. 2017). Haaroja jakaa malleja on näiden lisäksi muita sekä erinäisiä sekoituksia niistä, mutta edellä mainitut ovat nykyhetkellä aktiivisimmassa käytössä (Himanen 2020).

#### **3.4.1 Ohjattu oppiminen**

Ohjattu oppiminen on yleisin materiaalitekniikkaan sovellettu mallityyppi ja sen menestys on pitkälti riippuvainen datan riittävästä määrästä ja laadusta. Siinä data on tunnettua ja sisältää datan kuvaajat [Labels] (Schmidt et al. 2019). Ohjatussa oppimisessa pyritään yhdistämään tunnetut kuvaajat tuntemattoman funktion avulla niihin liitettyihin ulostuloihin (Dutta 2018 s. 48). Muokaten sisäisiä parametrejään malli pyrkii minimoimaan virheen ennustetun ja validointiarvon välillä, ja siten optimoi tuntemattoman funktion. Tämä lähestymistapa toimii suureen joukkoon eri regressio- ja luokittelutehtäviä. (Himanen, 2020)

### 3.4.2 Ohjaamaton oppiminen

Ohjaamaton oppiminen on huomattavasti yleisempää tietojenkäsittelytieteissä kuin materiaalitekniikassa, jossa se on kohtuullisen harvinaista (Bostanabad et al. 2018). Ohjaamattomassa oppimisessa datalla ei ole kuvaajia, vaan algoritmi muodostaa tuloksensa esimerkiksi datan jakautumisen ja keskittymien pohjalta (Schmidt et al. 2019). Varsinaista oikeaa ulostuloa, jota kohti algoritmi pyrkii ei ole, vaan se etsii, miten lähtödata on jaottunut. Kun malliin syötetään tunnettuja arvoja, se pyrkii linkittämään ne muodostamaansa jakaumaan ja siten liittämään niihin ominaisuuksia muiden samoina pitämiensä esimerkkien kautta. (Dutta 2018 s. 48)

### 3.4.3 PuoliOhjattu oppiminen

PuoliOhjattu oppiminen voi olla hyvä kompromissi, kun halutaan niin sanottuja Grey Box tuloksia, jotka palvelevat sekä tuloksellista että tieteellistä lähestymistä. Näissä malleissa on sekoitettu vähän kuvattua ja paljon kuvaamatonta dataa, joista tulos johdetaan. (Pan & Yang 2010; Correa-Baena et al. 2018) PuoliOhjattu oppiminen voi olla tehokas tekniikka myöskin puutteellisen datan osalta, joissa osa piirteiden arvoista puuttuu (Schmidt et al. 2019).

### 3.4.4 Vahvistusoppiminen

Vahvistusoppiminen on yleisesti käytetty peliteorian alalla (Sutton & Barto 2018). Siinä algoritmi pyrkii muokkaamaan tulostaan sellaiseksi, joka maksimoi määritellyn palkkion (Schmidt et al. 2019). Data muodostaa sekvenssin, jota muuttamalla vaikutetaan saavutettuun palkkioon (Bishop 2006). Lähtötilan datalle suoritetaan toiminto, jonka perusteella saavutetaan uusi tila, josta algoritmia palkitaan ja tämän palkinnon maksimoiminen johtaa optimaaliseen funktioon kyseisen palkitsemislogiikan osalta (Dutta 2018 s. 47).

## 3.5 Algoritmin valinta

Kun tavoitteet on määritelty, data on ositettu ja sen rakenne sekä piirteet tunnetaan, täytyy löytää algoritmi, joka tuottaa riittävän hyvän tuloksen. Koska pohjimmiltaan tietoa datasta saadaan sen rakenteiden ja kaavojen kautta, poimimalla sen sääntöjen takaiset

piirteet, mahdollistaa onnistuneen mallinnuksen lähes jokaisella algoritmilla (Ouyang et al. 2018). Tämä ei kuitenkaan usein vastaa todellisuutta, joten algoritmeja on kehitetty tuhansia ja uusia tuotetaan jatkuvasti riippuen tehtävän laadusta (Domingos 2012). Yleisesti myös todetaan, että yksinkertainen malli suurella määrällä dataa voittaa monimutkaisen mallin pienellä määrällä dataa, ja on parempi löytää joukko toimivia algoritmeja yhden parhaan sijasta. (Domingos 2012; Agrawal et al. 2014; Himanen 2020) Eräs kuuluisa teoria, ei ilmaista lounasta, [No Free Lunch Theorem] osoittaa, että jos tarkastellaan kaikkia mahdollisia funktioita, joilla ongelmaa voi koittaa ratkaista, ei saavuteta satunnaista arvausta parempaa valintaa. Myös jonkin funktion toimiessa hyvin tiettyyn ongelmaan, on sen toimittava satunnaista arvausta huomommin monen muun ratkaisuun. (Wolpert & Macready 1997) Substanssiosaamisella voidaan kuitenkin karsia valittujen algoritmien määrää nojaten oletuksiin tulosten tyypistä ja laadusta, esimerkiksi niiden jatkuvuuden tai hajonnan osalta (Domingos, 2012).

Koneoppivan mallin opetus ei ole kertakoonnista valmis prosessi. Algoritmin valintaan ja mallin opetukseen liittyy myös hyperparametrien säätö ja optimointitavan määrittäminen, jotta opetustuloksia ja -metodeja voidaan arvottaa keskenään. Sitten algoritmeja ajetaan eri asetuksin ja datan piirteitä ja osituksia muuttaen, kunnes riittävä tulos saavutetaan (Domingos, 2012; Himanen, 2020). Tyypillisiä käytettyjä algoritmeja ovat esimerkiksi Shinin ryhmän (2019) tutkimuksessaan käyttämä avoimen lähdekoodin Python-moduuli, Scikit-learn, ja siitä viisi algoritmia satunnais puu- [Random Forest], lineaarisen regression- [Linear Regression], lähimmän naapurin- [Nearest Neighbor], ydinfunktioregressio- [Kernel Ridge] ja bayesilainen algoritmi [Bayesian Ridge].

Domingos (2012) listaa koonnissaan yleisiä luokittelijamallien oppijoiden algoritmeja ja optimointiperusteita, joita on esitetty alla, Taulukko 1.

Taulukko 1. Oppimisalgoritmin komponentit (Domingos 2012)

<b>Oppijan komponentit</b>		
<b>Menetelmä</b>	<b>Arviointiperiaate</b>	<b>Optimointi</b>
Tukivektorikone [Support Vector Machine] K-lähin naapuri [K-Nearest Neighbor] Logistinen regressio [Logistic Regression] Päätöspuu [Decision Tree] Neuroverkot	Virheen neliösumma  Tarkkuus ja toistettavuus  Tiedon lisäys  K-L divergenssi [K-L Divergence]  -	Keilaetsintä [Beam Search] Ahne etsintä [Greedy Search] Rajoittamaton toiminta  Gradientin minimointi [Gradient Descent]  Lineaarinen optimointi [Linear Programming]

### 3.6 Mallin koostamisen vaiheiden yhteenveto

1. Tietokannan luonti esimerkiksi koetulosten ja kirjallisuuden pohjalta mahdollisesti yhdistäen valmiisiin kaupallisiin ja tieteellisiin tietokantoihin.
2. Tietokannan datan yhtenäistäminen, siivous, kuvailu ja luokittelu.
3. Datan ositus.
4. Datan piirteiden poiminta (algoritmien kanssa tai ilman).
5. Hyperparametrien määrittäminen.
6. Algoritmien valinta datan ja tavoitteiden perusteella.
7. Opetus.
8. Tulosten validointi.
9. Optimointi ja hyperparametrien säätö (mahdollisesti paluu kohtiin 2-4, esimerkiksi dimensionaalisuuden lisäämiseksi).
10. Kohtien 8 ja 9 toisto kunnes tulos on riittävä.
11. Uuden datan tuotto mallin avulla.



## **4 ESIMERKKEJÄ KONEOPPIVIEN MALLIEN KÄYTÖSTÄ**

### **4.1 Yleistä koneoppivien mallien hyödyntämisestä teollisuudessa ja tutkimuksessa**

Koneoppivien mallien käyttöä voidaan jakaa laajalle skaalalle tietokonetieteistä puhtaan materiaalitutkimuksen suuntaan. Esimerkiksi mikrorakennekuvista faasien ja raekoon automaattinen määrittäminen soveltaa konenäköä materiaalitekniiseen kohteeseen, mutta tiheysfunktioiteorialla [Density Functional Theory] ratkaistaan ab initio pohjalta atomaarisia materiaalmalleja hyvin lähellä puhtaita luonnontieteitä (Himanen 2020). Hart kollegoineen (2021) toteaa metalliseosten olevan erityisen haastavia mallinnuksen kohteita niiden jähmeiden liuosten epäjärjestyksen ja haastavan koostumuksellisen entropian vuoksi. Jos käytössä ei ole fysikaalisia piirteitä, jäävät mallien sisäiset toiminnot usein mysteeriksi (Hart et al. 2021).

Alla olevat erimerkit pyrkivät kattamaan malleja tutkimustiedon tuottamisesta, prosessien optimoinnista ja materiaaliparametrien parantamisesta sekä havainnollistamaan monipuolisesti koneoppivien mallien eri algoritmien mahdollisuuksia materiaalitekniikan saralla. Esimerkit valaisevat myös eri rooleja materiaalitekniikan asiantuntijalle mallien kehitystyössä. Panin ja Yangin katsaus (2010) siirto-oppimiseen [Transfer Learning], jossa tietoa siirretään mallilta toisille, toteaa, että samankaltaisen tiedon tuottaminen mallilla voi hyödyttää uusien mallien tuotantoa tulevaisuudessa. Aikaisemmista kokemuksista saadun tiedon hyödyntäminen mahdollistaa loogisten päätelmien teon uuden oppimisessa, myös mallien osalta (Pan & Yang 2010). Sama voidaan todeta myös materiaaliasiantuntijoista, jotka voivat tehdä älykkäitä ratkaisuja uusien koneoppivien mallien kehityksessä vanhojen pohjalta.

### **4.2 Mikrorakenteen automatisoitu määrittäminen mikroskooppikuvista**

Kuvien tunnistus on yksi vanhimpia ja tutkituimpia neuroverkoilla toimivien koneoppivien mallien tyyppejä (Koonce 2021). Tällaiset mallit tarvitsevat kuitenkin usein suuria määriä dataa yleistettävien tulosten luomiseksi ja niiden sisäinen toiminta jää pimentoon mallin kehittäjältä (Bostanabad et al. 2018).

Saadakseen paremman käsityksen metallurgisista prosesseista mikrorakenteen takana Müller ryhmineen (2020) käytti ohjattuun oppimiseen kuuluvia tukivektorikoneita [Support Vector Machine] mallissan, joka karakterisoi bainiittisia mikrorakenteita ultralujissa teräksissä. Nykyaikaisissa ultralujissa teräksissä on usein monimutkainen mikrorakenne ja esimerkiksi bainiittia on useaa eri tyyppiä, joiden luokittelusta ei olla yhtä mieltä tieteellisen yhteisön kesken. Myös Shen havaitsi tutkimuksessaan mikrorakeiden yhtenäisen luokittelun puutteen haasteen (Shen et al. 2019). Müller luokitteli bainiitin tutkimuksessaan viiteen eri tyyppiin, granulaariseen-, ylä-, ala-, degeneroituneeseen ylä-, ja degeneroituneeseen alabainiittiin, ja sisällytti tutkimukseensa niistä muut paitsi degeneroituneen alabainiitin. Lisäksi opetusdataan kuului martensiittisiä ja perliittisiä mikrorakenteita. (Müller et al. 2020)

Mallin data tuotettiin termomekaanisella simulaattorilla karkaistusta teollisuuden teräsnäytteistä, joiden tarkka seostus jätettiin kertomatta liikesalaisuussyistä, mutta hiilipitoisuudeksi ilmoitettiin 0,22 painoprosenttia, seosaineiksi mangaani, kromi ja nikkeli sekä mikroseosaineiksi boori, niobium ja titaani. Teräsnäytteistä muodostettiin hieet Zeiss Supra kenttäemissiopyyhkäisyelektronimikroskoopille, jolla otettiin tasakokoiset kuvat mikrorakenteesta 2000 kertaisella suurennoksella. Tarkempi kuvaus näytteiden analysoinnista on saatavilla julkaisusta. (Müller et al. 2020)

Kuvien piirteet ja kuvaajat tukivektorikonetta varten luotiin käyttäen Webelin ja kollegoiden (2018) kehittämää harmaaskaalamatriisimenetelmää [Grey Level Co-occurrence Matrix] Haralickin parametrien (Haralick et al. 1973) määrittämiseen. Tässä menetelmässä kuvaa pyöritetään asteen inkrementein välillä 1 - 180 astetta ja pikseleiden harmaustasot viereisiin pikseleihin nähden tilastoidaan. Pinnan topografiaerot tuottavat eri harmausasteen ja kontrastin, joiden avulla mikrorakenteita voitiin luokitella. (Webel et al. 2018). Näihin piirteisiin yhdistettiin vielä Ojalan ja kollegoiden (2002) paikallinen binäärikuvio [Local Binary Pattern], joka luo piirteen vertaamalla pikselin kontrastia ympäröiviin pikseleihin. Mikrorakenteiden kuvaus [Label] tuotettiin asiantuntija-arvioihin perustuen 15:sta perliittikuvasta, 24:stä granulaarisen bainiitin kuvasta, 57:stä degeneroituneen yläbainiitin kuvasta, 18:sta yläbainiitin kuvasta ja 18:sta martensiitin kuvasta. Arviot tuovat subjektiivisuutta mallin oppimiseen ja karakterisointi luottaa myös materiaalin homogenisuuteen mikroskooppikuvien ulkopuolella. (Müller et al. 2020)

Tukivektorikoneiden optimointiin ja piirteiden luontiin käytettiin MATLAB (MATLAB 2019) ohjelmistoa ja sen moduulia, joka säätää hyperparametrit ja ydinfunktion [Kernel] automaattisesti parhaan tuloksen antavaksi. Validointi tapahtui vertaamalla tuloksia k-jakojen välillä [K-Fold Cross Validation], jossa k:n arvo oli viisi. MATLAB koodi ja kokeen data on liitetty julkaisuun. (Müller et al. 2020)

Müllerin ryhmän malli kykeni lopulta luokittelemaan mikrorakenteet 91,80 % tarkkuudella, ja Müller suosittelee sen käyttöä esiluokittelijana tarkemmin rajattujen mallien piirteiden poimintaan. Parannuksia saataisiin lisäämällä datan määrää ja dimensionaalisuutta tukivektorimallille. Objektiviisuutta mikrorakenteen määrittämiseen voidaan parantaa käyttämällä ohjaamattoman oppimisen malleja, jotka ryhmittelevät mikrorakenteen mielestään samaan kategoriaan kuuluviin joukkoihin. (Müller et al. 2020)

## 4.3 Prosessiparametrien optimointi

### 4.3.1 Prosessin historiadatan louhinta optimaalisten asetusten löytämiseksi

Chong ja kollegat (2007) lähestyi tutkimuksessaan prosessin optimointiongelmia oletuksella, että prosessista kerätty historiadata poikkeamiseen, parametrien välisen korrelaation ja mahdollisten mittavaihteluiden seurauksena sisältää paljon ”kohinaa” [Noise]. Datan laadun vuoksi on vaikea johtaa perinteiseen tapaan funktiota lähtöasetusten ja lopputuotteen välille ja sitten optimoida kyseistä funktiota. (Chong et al. 2007)

Chong aloitti tutkimuksessaan prosessin optimoinnin jakamalla datan opetus- ja testiosioihin suositellen jakaumaa 3:2 tai 2:1 opetusdatan enemmistöllä. Sitten opetusdata standardisoitiin keskiarvolle nolla ja keskihajonnalle yksi. Opetusdatan dimensionaalisuutta karsittiin osittaisen pienimmän neliövirheen menetelmällä [Partial Least Squares] ja siihen lisättiin tunnettujen piirteiden asetusten lisäksi kaksi piilevää muuttujaa [Latent Feature] mahdollistamaan korkeamman asteiden ilmiöiden vaikutuksen huomiointi. Piilevien muuttujien määrä on lähes aina pienempi kuin tunnettujen piirteiden, ja niiden osuus optimoitiin validoimalla eri piilevien piirteiden määrä k-jakoon [K-Fold Cross Validation] perustuvassa virheen minimointikokeilussa. (Chong et al. 2007)

Deduktiivisessa prosessissa historiadatasta lähdetään louhimaan parhaita asetuksia käyttäen kärsivällistä säätöjä päättelevää PRIM-algoritmia [Patient Rule Induction Method], jonka Friedman ja Fisher (1999) kehittivät vuonna 1999. Kyseinen algoritmi asettaa datan eräänlaiseen laatikkoon, joka ympäröi laatupiirteeseen johtaneita prosessin asetuspieriteitä ja piileviä muuttujia. Algoritmi sitten ”kuorii” laatikon reunoilta piiriteitä, jolloin lopulta sen sisään olisi tarkoitus jäädä vain parhaisiin laatupiirteisiin johtaneita prosessipiiriteitä. Kerrallaan kuoritun datan määrä ja kuorinnan pysäytyskoon määrittäminen ohjaavat mallin toimintaa, ja niitä optimoimalla muutetaan algoritmin lopputulosta. Lisäksi se, miltä ”laatikon reunalta” dataa lähestytään, voidaan vaikuttaa siihen mitä piiriteitä karsitaan ensin. Tarkempi kuvaus algoritmin matemaattisista periaatteista havainnollistavin kuvaajin on esitetty julkaisussa. (Chong et al. 2007)

Mallia testattiin kahden prosessin, magneettisten teräsarkkien ja kovien tinalevyjen tuotannon osalta. Teräslevyjen valmistuksesta oli 1432 havaintojoukkoa muutamilla laatupiirteillä ja sadoilla prosessiparametreilla, joista valittiin yksi merkittävä laatupiirre ja seitsemän prosessipiirrettä. (Chong et al. 2007) Tinalevyihin oli käytössä vähemmän dataa, 205 havaintojoukkoa ja 25 prosessiparametriä. Laatuasteita oli vain yksi, Brinell-kovuus. (Chong et al. 2007) Teräksen osalta malli ehdotti 7,95% ja tinan kohdalla 12.2% parempaan tulokseen johtavaa prosessipolkua. (Chong et al. 2007)

Tutkimuksen kattavuutta lisää sen tulosten vertailu simulointimalliin, joka luo ja optimoi funktion prosessiparametrien ja laatuasteen välille. Kyseiseen vertailuun luotiin simuloitu historiatietokanta, jonka funktio oli tiedossa ja eri malleja vertailtiin parhaiden parametrien löytämiseksi. PRIM- mallien vahvuudeksi havaittiin huonolaatuisten ja pienempien datajoukkojen kanssa toimiminen, eivätkä ne lähes koskaan esittäneet ratkaisuja, jotka johtivat huonompiin lopputuloksiin kuin vertailukohta. (Chong et al. 2007) Virheiden välttäminen on erityisen tärkeää teollisuuden aloilla, joilla epäonnistumiset ovat erittäin kalliita ja yhdenkin tapahtuminen voi hävittää lukuisten pienten onnistumisten inkrementaalisen parannuksen hyödyt.

#### **4.3.2 Neuroverkko prosessiparametrien ja fyysisten ominaisuuksien välisen yhteyden löytämiseksi**

Shan ja Guon (2004) tutkimus on esimerkki vanhemmasta neuroverkoin tehdystä mallinnuksesta. Tutkimuksessaan he pyrkivät yhdistämään lukuisia mekaanisia

ominaisuuksia ja prosessiparametrejä maraging-teräksille. Neuroverkko on käytännössä kehittynyt tilastollinen malli, joka sovittaa epälineaarisia funktioita lähtö- ja loppupisteiden välille. Neuroverkko koostuu solmuista, jotka jäljittelevät aivojen neuronien toimintaa, ja muodostavat kerroksia. Jokainen solmu sisääntulossa edustaa riippumattoman muuttujan arvoa, piilotetussa kerroksessa solmut toteuttavat algoritmin funktion ja ulostulokerroksen solmut vastaavat mallinnettuja arvoja. Solmujen ja kerrosten lukumäärää sekä piilotetun kerroksen algoritmia muuttamalla voidaan vaikuttaa mallinnuksen tulokseen. (Sha & Guo 2004)

Shan ja Guon tutkimuksen tavoitteena oli selvittää iskusitkeyden, kovuuden, myötö- ja murtolujuuden, murtumissitkeyden, venymän ja martensiitin muodostuksen aloituslämmön yhteys prosessiparametreihin, seostukseen ja käyttölämpötilaan. Maraging-teräkset ovat voimakkaasti seostettuja ja vanhentamalla lujitettuja. Tämän vuoksi niiden ominaisuuksien takana olevia ilmiöitä on vaikea mallintaa, eikä fysikaalista mallia, joka selittäisi prosessin ja ominaisuuksien välisen yhteyden, ole tutkimuksen julkaisuhetkellä (2004) ollut olemassa. Voimakkaan seostuksensa vuoksi kyseiset teräkset ovat alttiita raaka-aineiden hinnanmuutosten seurauksena markkinaepävarmuudelle. (Sha & Guo 2004)

Neuroverkko valittiin simulointivälineeksi, sillä se ei vaadi taustailmiöiden tuntemista lopputulosten selittämistä varten. Tämän haittapuolena on toisaalta Black Box mallinnus. Tutkimuksen neuroverkko oli kolmikerroksinen sisältäen sisääntulo, piilotetun ja ulostulokerroksen. Piilotetun kerroksen algoritmiksi valittiin Bayesinen säännöstelyfunktio [Bayesian Regulation], mutta myös muita kokeiltiin. (Sha & Guo 2004)

Neuroverkon data saatiin kirjallisuudesta poimimalla maraging- ja matalahiilisten terästen ominaisuuksia, mutta niiden jakauma ei ollut tasainen. Myöskin data, joka linkittäisi usean ominaisuuden samoihin prosessiparametreihin oli harvinaista. Monista nykyaikaisista tutkimuksista poiketen datan normalisointi ja ositus oli yksinkertaista. Esimerkiksi piirteiden poiminnassa käytettiin seosaineiden osalta tilastollista mallia ja prosessiparametrit poimittiin asiantuntijoiden intuition perusteella. Yleisesti tutkimuksessa ei mainittu juuri yritystä ja erehdystä kummempaa optimointiprosessia piirteiden, algoritmin ja datan optimointiin, vaikkakin mallien eri iteraatioiden tuloksia

vertailtiin tilastollisesti (Sha & Guo 2004). Tämä on osaltaan automatisoitu monessa muussa tässä työssä esitetyssä uudemmassa tutkimuksessa.

Jokaista ominaisuutta kohti oli luotava oma mallinsa, sillä neuroverkkojen prosessointiaika pitenee huomattavasti datan ja ulostulojen dimensionaalisuuden mukaan. Myöskään lähtödatan laatu ei mahdollistanut usean ominaisuuden selvittämistä samalla mallilla. Kuitenkin monen mallin tulos yhdistettiin yleismalliksi, joka kykeni ennustamaan useaa ominaisuutta. (Sha & Guo 2004)

Kun mallit oli opetettu ja optimoitu, saatiin niillä suhteellisen hyviä tuloksia ennustustarkkuuden osalta. Esimerkiksi lujuuden keskivirhe jäi alle 5 MPa:n, mutta maksimivirhe oli yli 100 MPa. Tämä on kuitenkin suhteutettava maraging-terästen suureen lujuuteen, joka voi olla yli 2000 MPa. Parhaat tulokset saatiin kovuuden osalta ja lopputuloksena malliin pystytään syöttämään eri koostumus- ja prosessi-arvoja saaden ulos yhdistelmän eri ominaisuuksia, monen sovellutuksen kannalta riittävällä tarkkuudella. Mallin tulosten käyttölämpötila-aluetta pyritään vielä laajentamaan jatkokehityksessä, mutta neuroverkkojen teho tuntemattomien ilmiöiden tulkintaan on osoitettu tutkimuksessa. (Sha & Guo 2004)

### **4.3.3 Koneoppiva prosessiennustus operaattorin tueksi**

Monimutkaisia prosesseja, joita ei voida mitata, on vaikea hallita niiden lopputulosten varianssin osalta (Bae et al. 2021). Esimerkin tällaisesta tarjoaa terästehtaan konvertteri [Basic Oxygen Furnace], jossa raudasta poltetaan hiiltä, kunnes se muuttuu teräkseksi. Prosessin alusta ja lopusta saadaan paljon mittausdataa, mutta itse happipuhalluksen aikana konvertterin sisäympäristö on niin tuhoisa, että siitä on vaikea saada mittauksia. Konvertterin staattisen ohjauksen periaate nojaakin kokemukseen prosessista tähdätyn tuloksen saavuttamiseksi. (Holappa 2020)

Bae kollegoineen (2021) käytti neuroverkkoja selvittääkseen konvertterin puhallusprosessiin vaikuttavia ilmiöitä staattisen ohjauksen parantamiseksi. SSAB:n siistitystä historiakannoista poimittiin 114 piirrettä yli 9000 sulatukselle. Merkittäviä tekijöitä poimittiin LASSO ja SHAP menetelmin, joista SHAP edustaa neuroverkkoja ja LASSO regressioanalyysiä. (Bae et al. 2021) On kuitenkin hyvä huomioida, että tutkimuksessaan Ouyang (2018) totesi LASSOn olevan osittain puutteellinen menetelmä.

Molemmat mallit Baen ryhmän malleista onnistuivat poimimaan asiantuntijoiden tunnistamia merkittäviä piirteitä, ja lisäksi nostivat uudeksi sellaiseksi happilanssin numeron. Numero yksilöi eri happilanssit ja sen pohdittiin heijastavan niiden geometrisia eroja. SHAP malli tuottaa myös hajonnan eri piirteiden vaikutukselle tarjoten dataa niiden luotettavuudesta eri tilanteissa. (Bae et al. 2021) Tämä voi olla erittäin hyödyllinen operaattorille, joka on tottunut tekemään päätöksiä tekijöiden perusteella, mutta ei osaa painottaa niitä tilanteen mukaan. Asiantuntijoille tuntemattoman piirteiden löytyminen korostaa koneoppivien mallien hyötyä totutuista tavoista poikkeamiseen, sillä mallit etsivät kaavoja ilman vahvoja ennako-oletuksia.

#### 4.4 Kohdeominaisuuden parantaminen

Shenin ja tutkimusryhmän (2019) päämääränä oli kehittää systemaattisesti fysikaalisen metallurgian tukema koneoppiva malli, joka oli kokeellisesti validoitu uusien ultralujien ruostumattomien terästen koostumuksen ja prosessoinnin parantamiseksi. Mallin lähtödata kerättiin kirjallisuudesta, ja jaoteltiin terästä lujittavien erkaumien mukaan. R-faasin lujittamia ruostumattomia teräksiä oli 102 kappaletta, kuparin erkaumien 124 kappaletta ja Ni<sub>3</sub>Ti lujitteisia 116 kappaletta. Kaikki lähtödatan teräkset oli tuotettu samalla normalisointi- ja kuitaaltaan martensiittiseen rakenteeseen johtaneen karkaisun prosessointireitillä. (Shen et al. 2019)

Ominaisuus, joita teräksissä lähdettiin parantamaan, oli kovuus, sillä sen mittaustulokset oletettiin yhtenäisiksi eri kirjallisuuslähteiden laboratorien välillä. R-faasin datajoukko valittiin opetusdataksi ja muiden lujitusmekanismien datalla päätettiin testata mallin kykyä yleistää tuloksia opetusdatansa ulkopuolelle. Piirteiksi, joiden perusteella kovuutta lähdettiin optimoimaan, valittiin kemiallinen koostumus ja pääprosessiparametreiksi päästölämpö ja -kesto. Jotta mikrorakenteen luonteesta saatiin parempi kuva mallille, lisättiin datan dimensionaalisuutta vielä simuloituilla erkaumien tasapainon tilavuusosuuksilla [Equilibrium Volume Fraction] ja erkautumista ajavan voiman [Precipitation Driving Force] arvoilla. Datan luotettavuus testattiin valmistamalla yksi kirjallisuuden seostus kuvatulla prosessireitillä ja vertaamalla sen kovuutta kirjallisuuden arvoihin eri päästölämmöillä ja -ajoilla. Data todettiin luotettavaksi, sillä replikoidut arvot olivat hyvin lähellä kirjallisuuden esimerkkejä. (Shen et al. 2019)

Itse mallinnusprosessi oli monimutkainen nojaten eri koneoppiviin malleihin eri vaiheissa koostumuksen parantamista. Ensin normalisoitu R-faasidata, jaettiin 80 opetus- ja 22 testipisteeseen viidelläsadalla eri osituksella ja niille tuotettiin viisisataa eri tukivektorikonetta. Koska datan määrä oli niin pieni, monta ulos- jakoa [Multiple Hold Out] käytettiin keskiarvoistamaan eri ositusten jakaumien eroja mallien välillä. Tukivektorikoneen hyvyttä arvioitiin sen yleistämiskyvyn perusteella mitattuna tulosten selitysasteella [Squared Correlation Coefficient] ja keskivirheellä [Mean Absolute Error] koedatujen kovuuden ja ennustettujen arvojen välillä. (Shen et al. 2019)

Tukivektorikoneiden ydinfunktiona käytettiin radiaalifunktiota [Radial Basis Function] jota ohjasi kaksi muuttujaa/hyperparametria, rangaistuskerroin ja jakaumakerroin. Rangaistuskerrointa säätämällä vaikutetaan yli- ja alimallinnukseen ja jakaumakerroin ohjaa muunnosfunktion käyttämän datan jakaumaa ja vektorien määrää. Näiden kertoimien yhdistelmien vaikutusta optimoitiin käyttäen geneettistä algoritmia kokeilemaan eri arvoja, kunnes malli konvergoi parhaan yleistyskyvyn omaava tukivektorikoneeseen. Tässä vaiheessa ero 500:n tukivektorikoneen syöttödatan kovuuksien ja ennustetun kovuuden välillä oli suurimmillaan 4,5 HRC. 70 ennustusta 102:n datajoukosta oli 1 HRC:n sisällä osoittaen pientä hajontaa mallien tuottamien tulosten välillä. (Shen et al. 2019)

155:een parhaaksi arvioituun malliin ajettiin geneettinen algoritmi poimimaan potentiaalinen uusi koostumus ja prosessointiyhdistelmä kovuuden maksimoimiseksi. Näistä 155:stä mallista 116 arvioitiin toimivan paremmin kuin kirjallisuuden teräslaadut. Jotta näistä 116:sta eri teräslaadusta pystyttäisiin muodostamaan koe-erät, luotiin uusi kategorisoiva tukivektoriluokittelija [Support Vector Classifier] erottelemaan potentiaaliset uudet laadut korkealla varmuudella koviin ja pehmeisiin. Yli 49 HRC:n kovuutta pidettiin kokeilemisen arvoisena.

Tukivektoriluokittelija opetettiin myös tunnistamaan tekijöitä kovuuden takana, ja siten lajittelemaan eri laatuja kategorioihin. Tämä lajittelu paljasti samankaltaisuuksia potentiaalisissa laaduissa ja rajasi 116 näytteen joukon vain 11:sta eri teräkseen. Näistä 11:sta laadusta huomattiin kaksi merkittävää koostumusjakoa ja loppu vaihtelu riippui päästökäsittelystä. Toinen koostumusjako hylättiin sen nikkelpitoisuuden ollessa lähellä



sallittua ylärajaa, jolloin jäljelle jäänyt koostumus valettiin eri päästökokeita varten. Tarkempi näytteenvalmistus on kuvattu julkaisussa. (Shen et al. 2019)

Lopputuloksena uusi seostus saavutti kovuuksia eri lämpökäsittelyillä väliltä 44-51 HRC, ja suurin kovuus saavutettiin mallin ennustamalla prosessilla. Kovuus myös ylitti kirjallisuudesta poimittujen laatujen kovimman arvon käyttäen vähempiä seosaineita, minkä voidaan ajatella olevan taloudellisempi ratkaisu. (Shen et al. 2019) Uuden seostuksen koostumus jätti myös teoreettista tilaa paremmalle erkaumarakenteelle perustuen sen sisäiseen energiaan ja faasiosuuksiin, mahdollistaen kenties vieläkin parempien ominaisuuksien tuottamisen tulevaisuudessa. (Shen et al. 2019)

Lisävalidointi mallin tulosten osalta tekee tutkimuksesta poikkeuksellisen laajan. Jotta fysikaalisen metallurgian ohjauksen hyödyt pystyttiin erottamaan onnistuneesta mallinnuksesta, sama koe toteutettiin ilman niitä. Vektorimallit ilman simuloituja erkauma-arvoja tai asiantuntijoiden rajauksia tuottivat onnistuneita tuloksia, mutta niiden ylimallinnuksen osuus oli suurempi ja ne myös ehdottivat tuloksia, jotka eivät olleet realistisia. Yksi tällainen ennustetun 72 HRC:n kovuuden omaava laatu tuotti tulokseksi vain 30 HRC nojaten ominaisuuden lämpökäsittelyalueelle, jolla lujittavia erkaumia ei pysty muodostumaan. Onnistuneen mallinnuksen taustalla todettiin myös olevan laadukas koedata, joka itsessään toimii suodattimena asiantuntijätiedon osalta. (Shen et al. 2019)

Lisäksi geneettisen algoritmin ja ydinfunktion vertailut suoritettiin useilla funktiotyypillä, mutta näitä tuloksia ei sisällytetty julkaisuun. Datan osituksen vaikutusta tutkittiin myös 100:n eri osituksen testimallinnuksella. Myös uusien koostumusten suhteellista eroa kirjallisuuteen verrattiin, jotta vahingossa ei keksittäisi samaa laatua uudelleen. Lopuksi muu erkaumadata lisättiin malliin, jolloin mallin tarkkuus ei huonontunut, mutta sen kyky yleistää tuloksia parani. (Shen et al. 2019)

Kokonaisuutena tutkimus osoittaa fysikaalisen metallurgian tarjoaman hyödyn ja tarjoaa yksityiskohtaisen kuvauksen tarkan mallinnuksen saavuttamiseksi. Lopputuloksen uusi teräslaatu on kovuuden osalta parempi, mutta muiden ominaisuuksien muutosta ei kirjattu julkaisuun. Myöskin koostumuksen erittäin matala hiilipitoisuus, 0,002 painoprosenttia, on mahdollisesti haastava valmistuksen kannalta erityisesti seosainepuhtauden osalta.

Lisäesimerkkejä ominaisuuksien parantamisesta tarjoavat mm. Shin ja kollegat (2019) virumisenkestävyyttä optimoivassa tutkimuksessaan.

## 5 YHTEENVETO

Tässä tutkielmassa käytiin läpi nykyisen materiaalitutkimuksen haasteita ja yhtä vastausta niihin: koneoppivien mallien hyödyntämistä. Lisääntyneen kilpailun ympäristössä, joka kuitenkin tarjoaa ennenäkematöntä laskentatehoa, muistikapasiteettia ja laadukkaan datan määrää voidaan pitää potentiaalisena suurelle menestykselle tai nopealle alan kehityksen kelkasta putoamiselle.

Kirjallisuuslähteistä poimittujen koneoppivien mallien osoitettiin ratkaisevan ongelmia, joihin perinteisen tutkimuksen lähestymistavat eivät riittäneet, kuten yhteyksiä prosessiparametrien ja monimutkaisiin ilmiöihin pohjautuvien ominaisuuksien välillä. Koneoppivien mallien kyky käydä läpi kaikki tutkimushypoteesit automaattisesti ja kehittää niiden ratkaisutapoja aikaisemmin kokeiltujen yritysten pohjalta tekee niistä todella tehokkaan vaihtoehdon ihmisen toteuttamille empiirisille kokeille. Mallit pyrkivät yleistämään ennustuksiaan oman opetusdatansa ulkopuolelle avaten uusia kohteita empiiristen kokeiden järjestämiselle. Koneoppivien mallien tulokset ovat myös objektiivisempia ja omaavat tyypillisesti tasaisemman hajonnan, kuin eri tutkimusryhmien kokeellinen data. Esimerkiksi mikrorakennekuvien automatisoidussa tunnistuksessa koneoppiva malli kategorisoi rakenteet samoihin sääntöihin perustuen objektiivisesti, verrattuna ihmiseen.

Toimiakseen tehokkaasti koneoppivat mallit tarvitsevat laadukasta dataa, jota löytyy jo kirjallisuudesta, kaupallisista tietopankeista ja teollisuuden prosessien historiakannoista. Eri tietolähteiden yhdistäminen sisältää kuitenkin riskin datapisteiden välisen vertailukelpoisuuden osalta. Tiedon hallinta ja muokkaus koneoppiville malleille ei ole yksiselitteinen prosessi ja sen kuvaaminen, normalisointi ja suodatus sellaiseen muotoon, joka minimoi piirteet tutkittavan ilmiön kannalta olennaisiin muuttujiin, on yksi mallinnusprosessin työläimpiä vaiheita. Tämän piirteiden poiminnaksi kutsuttu osuus on erinomainen kohde materiaaliasiantuntijoiden hyödyntämiseen, ja sen onnistuminen mahdollistaa hyvien tuloksen saavuttamisen laajemmalla määrällä eri algoritmeja.

Myöskään yhtä parasta algoritmia ei ole olemassa, vaan on parempi etsiä joukko hyvin toimivia malleja. Datan tyyppi ja rakenne ohjaavat, minkälainen algoritmi soveltuu sen

analysointiin. Esimerkiksi kategoriset ja jatkuvat muuttujat vaativat erilaiset lähestymistavat. Joidenkin algoritmien toimintaperiaate jää tuntemattomaksi, jolloin niiden toiminnan avaamiseen voidaan vaatia uusia koneoppivia ratkaisuja. Tuntemattoman prosessin luotettavuutta voidaan kuitenkin tarkastella huolellisella validointiprosessilla, joka pohjautuu mallin opetuksesta erotettuun dataan. Näillä datan osituksilla on tärkeä rooli mallien validoinnissa erityisesti pienten lähtötietokantojen osalta. Ositusten, piirteiden ja algoritmien muokkaus on koneoppivien mallien kannalta jatkuva prosessi parempien tulosten saavuttamiseksi. On kuitenkin tärkeä muistaa koneoppivien mallien tulosten perustuvan lähes aina korrelaatioihin datapisteiden välillä. Tämän vuoksi mallinnettuja tuloksia ei voi suoraan yleistää kausaaliseksi suhteeksi ilmiön ja sen lähtödatan välille.

Seuraava askel on tarkastella tarkempaa matematiikkaa algoritmien ja niiden optimoinnin takana, sillä työ ei juuri ota kantaa miksi tai mikä matemaattinen lähestymistapa on onnistumisen takana eri ongelmatyypeille. Tiedon määrän ja arvon lisääntyessä työ ei myöskään pohdi tietoturvariskejä, mitä oman ja ulkoisen datan yhdistämiseen saattaa liittyä. Jos lukija tahtoo perehtyä aiheeseen syvemmin, materiaali-informatiikan nouseva ala tarjoaa monipuolisemman katsauksen tietokone- ja dataohjattuun materiaalitutkimukseen teräksen lisäksi, esimerkiksi Himasen (2020) palkitun väitöskirjan kautta.

Kirjoittajan kanta kuitenkin on, että ilman ymmärrystä keinoista hyödyntää olemassa olevia suuria tietoarkistoja, häviää aina sellaiselle, jolla on pääsy hyödyntämään niihin kätkeytyviä vastauksia.

## LÄHDELUETTELO

A.SPIRE, 2020. Model-based optimisation for efficient use of resources and energy [verkkodokumentti]. Saatavissa: <https://www.aspire2050.eu/morse> [viitattu 4.5.2020].

Agrawal, A., Deshpande, P. D., Cecen, A., Basavarsu, G. P., Choudhary, A. N. & Kalidindi, S. R., 2014. Exploration of data science techniques to predict fatigue strength of steel from composition and processing parameters. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation* 3, s. 90–108.

Alpaydin, E., 2014. *Introduction to Machine Learning*. 13 painos. Cambridge (MA): The MIT Press, 712 s. ISBN 9780262043793.

Bae, J., Mathiason, G., Li, Y., Kojola, N., & Ståhl, N., 2021. Understanding Robust Target Prediction in Basic Oxygen Furnace [verkkodokumentti]. *The 2nd International Conference on Industrial Engineering and Industrial Management (IEIM 2021)*. Barcelona: ACM New York, S. 56–62. Saatavissa: <https://doi.org/10.1145/3447432.3447435> [viitattu 14.2.2022]. 7 s.

Belisle, E., Huang, Z., Le Digabel, S., & Gheribi, A. E., 2015. Evaluation of machine learning interpolation techniques for prediction of physical properties. *Computer Materials Science*, 98, s. 170–177.

Bishop, C. M., 2006. *Pattern Recognition and Machine Learning*. New York: Springer, 703 s. ISBN 9780387310732. Saatavissa: <https://docs.google.com/viewer?a=v&pid=sites&srcid=aWFtYW5kaS5ldXxpc2N8Z3g6MjViZDk1NGI1NjQzOWZiYQ> [viitattu 14.2.2022].

Bostanabad, R., Zhang, Y., Li, X., Kearny, T., Brinson, C. L., Apley, D. W., Chen, W., 2018. Computational microstructure characterization and reconstruction: Review of the state of the art techniques. *Progress in Materials Science*, 95, s. 1–41.

Chen, L.-Q. & Gu, Y., 2015. Computational metallurgy. Teoksessa: Laughling D. E & Kazuhiro H. (toim.) Physical Metallurgy. 5 painos. United Kingdom: Elsevier B. V., s. 2837–2899. ISBN 978-0-444-53770-6.

Chen, M.-S., Han, J., & Yu, P. S., 1996. Data Mining; An Overview from a Database Perspective. IEEE transactions On Knowledge And Data Engineering, 8 (6), s. 866–883.

Chong, I.-G., Albin, S. L., & Jun, C.-H., 2007. A data mining approach to process optimization without an explicit quality function. IIE Transactions, 39, s. 795–804.

Correa-Baena, J.-P., Hippalgaonkar, K., van Duren, J., Jaffer, S., Chandrasekhar, V. R., Stevanovic, V., Buonassisi, T., 2018. Accelerating Materials Development via Automation, Machine Learning, and High-Performance computing. Joule, 2, s. 1410–1420.

Dastin, J., 2018. Reuters - Amazon scraps secret AI recruiting tool that showed bias against women [verkkodokumentti]. Saatavissa: <https://www.reuters.com/article/us-amazon-com-jobs-automation-insight-idUSKCN1MK08G> [viitattu 14.3.2022].

Domingos, P., 2012. A Few Useful Things to Know About Machine learning. Communications of the ACM, 55 (10), s. 78–87.

Dutta, S., 2018. Reinforcement Learning with TensorFlow: A Beginner's Guide to Designing Self-learning Systems with TensorFlow and OpenAI Gym. Birmingham: Packt Publishing, 334 s. ISBN 9781788835725.

European Commission, 2022. Cluster 4: Digital, Industry and Space [verkkodokumentti]. Saatavissa: [https://ec.europa.eu/info/research-and-innovation/funding/funding-opportunities/funding-programmes-and-open-calls/horizon-europe/cluster-4-digital-industry-and-space\\_en](https://ec.europa.eu/info/research-and-innovation/funding/funding-opportunities/funding-programmes-and-open-calls/horizon-europe/cluster-4-digital-industry-and-space_en) [viitattu 3.3.2022].

Fan, D. W., Kim, H. S., & De Cooman, B. C., 2009. A Review of the physical metallurgy related to the hot press forming of advanced high strength steel. Steel Research International, 80 (3), s. 241–248.

Friedman, J. H., & Fisher, N. I., 1999. Bump Hunting in High-Dimensional Data. *Statistics and Computing*, 9, s. 123–143.

Galindo-Nava, E. I., & Rivera-Díaz-del-Castillo, P. E., 2015. A model for the microstructure behaviour and strength evolution in lath martensite. *Acta Materialia*, 98, s. 81–93.

Ghiringhelli, L. M., Vybiral, J., Sergey, V., & Levchenko, C. D., 2015. Big data of materials science: critical role of the descriptor. *Physical Review Letters*, 114 (10), s. 105503 1–5.

Haralick, R. M., Dinstein, I., & Shanmugam, K., 1973. Texture features for Image Classification. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, 3 (6), s. 610–621.

Hart, G. L., Mueller, T., Toher, C., & Curtarolo, S., 2021. Machine learning for alloys. *Nature Reviews Materials*, 6 (8), s. 730–755.

Himanen, L., 2020. *Materials Informatics - Augmenting Materials Research with Data-driven design and Machine Learning [Verkkodokumentti]*. Väitöskirja. Aalto yliopisto. Saatavissa: <https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/43027> [viitattu 26.9.2021].

Himanen, L., Jäger, M. O., Morooka, E. V., Canova, F. F., Ranawat, Y. S., Gao, D. Z., Foster, A. S., 2020. Dscribe: Library of descriptors for machine learning in materials science. *Computer Physics Communications* 247, s. 1–12.

Holappa, L., 2020. *Raudan ja teräksen valmistus*. Teoksessa: Hannula S.-P., Haimi E. & Lindroos V. (toim.), *Uudistettu Miekk-Ojan Metallioppi Osa II*. Helsinki: Teknologiateollisuus ry, s. 20–22.

Jain, A., Ping Ong, S., Hautier, G., Chen, W., Davidson Richards, W., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G. & Persson, K.A., 2013. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials* 1 (1). s. 1-11.

Jiang, M., Yang, X., Pan, S., Krauker, B. W., & Zhu, M., 2012. Correlation between Microstructures and Yield Strength of a High Strength Enameling Steel. *Journal of Materials Science & Technology*, 28 (8), s. 737-744.

Karjalainen, P. & Larkiola, J., 2020. Teräksen Kuumamuokkauksen Simulointi. Teoksessa: Hannula S.-P., Haimi E. & Lindroos V. (toim.), *Uudistettu Miekk-Ojan Metallioppi Osa II*. Keuruu: Otavan Kirjapaino Oy, 272 s. ISBN 9789523282443.

Koonce, B., 2021. *Convolutional neural networks with Swift for Tensorflow: image recognition and dataset categorization*. Jefferson, MO, USA: Apress. 268 s. ISBN 9781484261675.

MATLAB, 2019. *MATLAB R2019b*. [tietokoneohjelma]. Natick (MA): MathWorks.

Metalliteollisuuden Standardintyhdistys ry., 2004. SFS-EN 10168 Terästuotteiden ainestodistukset. Tietoryhmät ja niiden kuvaukset. Helsinki: Suomen Standardisoimisliitto SFS ry.

Mitchell, T., 1997. *Machine Learning*. New York: McGraw-Hill, 414 s. ISBN 00704280777.

Müller, M., Britz, D., Ulrich, L., Staudt, T., & Mücklich, F., 2020. Classification of Bainitic Structures Using Textural Parameters and Machine Learning Techniques. *Metals*, 10 (5), 630, s. 1–19. doi.org/10.3390/met10050630.

Nes, E., 1995. Recovery revisited. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43 (6), s. 2189–2207.

Nguyen, H., Maeda, S.-I., & Oono, K., 2017. Semi-supervised learning of hierarchical representations of molecules using neural message passing. *31st Neural Information Processing Systems*, Long Beach: NIPS. s. 1-8.

Ojala, T., Pietikäinen, M. & Mäenpää, T., 2002. Multiresolution gray-scale and rotation invariant texture classification with local binary patterns. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 24 (7), s. 971–987.



Open Science Collaboration, 2015. Estimating the reproducibility of psychological science. *Science*, 349 (6251), s. 943–943.

Oulun yliopisto, 2020. Center for Advanced Steels Research [verkkodokumentti]. Saatavissa: <https://www oulu.fi/casr/> [viitattu 2.10.2021].

Ouyang, R., Curtarolo, S., Ahmetcik, E., Scheffler, M., & Ghiringhelli, L. M., 2018. SISO: A compressed-sensing method for identifying the best low-dimensional descriptors in an immensity of offered candidates. *Physical Review Materials*, 2, s. 1–11.

Pan, S. J., & Yang, Q., 2010. A Survey on Transfer Learning. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 22 (10), S. 1345–1359.

Porter, D. A., & Easterling, K. E., 1992. *Phase Transformations in Metals and Alloys*. 2 painos. Cornwall: Chapman & Hall. 514 s. ISBN 978148993014.

Pyle, D., 1999. *Data Preparation for Data Mining*. San Fransisco: Morgan Kaufmann publishers Inc. 560 s. ISBN 9781558605299.

Raabe, D., 2015. *Recovery and Recrystallization: Phenomena, Physics, Models, Simulation*. Teoksessa: Laughling D. E. & Kazuhiro H. (toim.) *Physical Metallurgy*. United Kindom: Elsevier. s. 2291–2387. ISBN 9780444537706.

Raccuglia, P., Elbert, K. C., Adler, P. D., Falk, C., Wenny, M. B., Mollo, A., Norquist, A. J., 2016. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments. *Nature*, 533, s. 73–76.

Schmidt, J., Marques, M. R., Botti, S., & Marques, M. A., 2019. Recent advances and applications of machine learning in solidstate materials science. *npj Computational Materials*, 5 (83), s. 1–36. <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0>.

SFS-EN 100025-1-6, 2019. Tekniset toimitusehdot. Helsinki: Suomen Standardisoimisliitto SFS ry.

SFS-EN ISO 6272-1-2, 2012. Paint and varnishes - Rapid-deformation (impact resistance) tests. Helsinki: Suomen Standardisoimisliitto SFS ry.

Sha, W. & Guo, Z., 2004. Modelling the correlation between processing parameters and properties of maraging steels using artificial neural networks. *Computational Materials Science*, 29 (1), s. 12–28.

Shen, C., Wang, C., Wei, X., Li, Y., van der Zwaag, S., & Xu, W., 2019. Physical metallurgy-guided machine learning and artificial intelligent design of ultrahigh-strength stainless steel. *Acta Materialia*, 179, s. 201–214.

Shin, D., Yamamoto, Y., Brady, M. P., Lee, S., & Haynes, J. A., 2019. Modern data analytics approach to predict creep of high-temperature alloys. *Acta Materialia*, 168, s. 321–330.

Sutton, R. S. & Barto, A. G., 2018. *Reinforcement Learning*. 2 painos. Cambridge (MA): The MIT Press, 552 s. ISBN 9780262039246.

Teknologiateollisuus, 2020. Jätti-investointi vähentää 7 prosenttia Suomen hiilidioksidipäästöistä – SSAB:n investointi ja bisnes ovat mallikappale teknologiateollisuuden kädenjäljestä [verkkodokumentti]. Saatavissa: <https://teknologiateollisuus.fi/fi/ajankohtaista/artikkeli/jatti-investointi-vahentaa-7-prosenttia-suomen-hiilidioksidipaastoista> [viitattu 2.10.2021].

Webel, J., Gola, J. B., & Mücklich, F., 2018. A new analysis approach based on Haralick texture features for the characterization of microstructure on the example of low-alloy steels. *Materials Characterization*, 144, s. 584–596.

Weir, K., 2015. American Psychological association-A reproducibility crisis? [verkkodokumentti]. Saatavissa: <https://www.apa.org/monitor/2015/10/share-reproducibility> [viitattu 6.2.2022].

Westphal, C. & Blaxton, T., 1998. *Data Mining Solutions Methods and Tools for Solving Real-World Problems*. New York: John Wiley and Sons, Inc., 640 s. ISBN 9780471253846.

Wolpert, D. H. & Macready, W. G., 1997. No Free Lunch Theorems for Optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1 (1), s. 67–82.