

0.1. Погудин В.Ю., Пономарев А.Н., Резванова А.Е., Кудряшов Б.С. Анализ методов машинного обучения для прогнозирования микротвердости керамического материала на основе гидроксипатита

Целью работы является оптимизация создания керамики на основе гидроксипатита (ГА) с добавлением многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) с заданными механическими свойствами методами машинного обучения при помощи библиотек на языке Python. В процессе работы проводилось прогнозирование промежуточных значений микротвердости керамических материалов по подаваемой на них нагрузке различными методами машинного обучения и выявление наилучшего из них. Датасет, на котором обучались модели, основан на данных измерения твердости экспериментальных образцов методом Виккерса при нагрузках 100, 200, 300 и 500 грамм-сил. Измерения производились на трех типах образцов: чистом ГА, ГА + 0.5 масс. % МУНТ (серия 1), ГА + 0.5 масс. % МУНТ (серия 2). На каждую нагрузку приходилось множество измерений. Полученные значения твердости имеют высокий разброс, что связано с неоднородностью и пористостью материала, а также погрешностями измерения.

При создании регрессионной модели были проанализированы несколько методов машинного обучения, а именно:

- линейная регрессия;
- полиномиальная регрессия;
- случайный лес решений;
- регрессор Ada Boost (адаптивного бустинга);
- регрессор XGBoost (экстремального градиентного бустинга);
- нейронная сеть.

Для реализации первых 4 моделей использовалась библиотека scikit-learn [1]. Для второго метода бустинга применялась библиотека XGBoost [2]. Нейронная сеть была создана с помощью Keras [3].

Чтобы определить, насколько хорошо подобрана линия использовалась функция потерь, которая показывала разницу между предсказанным и реальным значениями. Одной из самых распространённых является средняя квадратичная ошибка (RMSE):

$$RMSE = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_i)^2},$$

где n – количество значений;

x_i – экспериментальное значение;

$\bar{x}_i$ – предсказанное значение.

В результате анализа лучше всего показала себя модель регрессора на основе нейронной сети, которая применялась для интерполяции значений твердости

экспериментальных образцов керамики на основе гидроксипатита.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2022-0002

Научный руководитель — д.ф.-м.н. Пономарев А. Н.

Список литературы

- [1] Scikit-learn. [Электронный ресурс]. URL: <https://scikit-learn.org/stable/> (дата обращения 21.02.2024).
- [2] XGBoost. [Электронный ресурс]. URL: <https://neerc.ifmo.ru/wiki/index.php?title=XGBoost> (дата обращения 21.02.2024).
- [3] Keras: Deep Learning for humans. [Электронный ресурс]. URL: <https://keras.io/> (дата обращения 07.03.2024).