

Слайд 1

Уважаемый председатель, уважаемые члены государственной аттестационной комиссии!

Тема моей выпускной квалификационной работы – **«ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ПЛАСТИЧНОСТИ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ».**

Слайд 2

Итак, **целью** работы является разработка модели машинного обучения с использованием генетического алгоритма для предсказания пластических свойств высокоэнтروпийных сплавов.

Задачи исследования представлены на слайде.

Слайд 3

Также на слайде представлены материалы и методы исследования.

Слайд 4

Итак, генетический алгоритм — это стохастический алгоритм поиска, применяемый для решения задач оптимизации. Идея генетических алгоритмов заимствована у живой природы и состоит в организации эволюционного процесса, конечной целью которого является получение оптимального решения в сложной комбинаторной задаче.

Слайд 5

В свою очередь, машинное обучение – это область научного знания, имеющая дело с алгоритмами, способными обучаться. Необходимость использования методов машинного обучения объясняется тем, что для многих сложных задач очень сложно разработать "явный" алгоритм их решения, однако часто можно научить компьютер обучиться решению этих задач.

Слайд 6

Таким образом, нетрудно убедиться, что число комбинаций из отобранных признаков неограниченно огромно. С этой целью используем генетический алгоритм, который может достаточно быстро найти оптимальное решение. Каждый признак сплавов шифруется целым числом от 1 до 72, что обозначает номер выбранного признака. Следовательно, набор дескрипторов,

подлежащих оптимизации будет описываться строкой, состоящей из вещественных чисел от 1 до 72. Основная блок-схема эволюционного приведена на рисунке. Определённый набор признаков должен обеспечить наибольшую точность для определения пластичности высокоэнтропийных сплавов. Таким образом может быть достигнута оптимальная комбинация модели машинного обучения и дескрипторов материалов.

Слайд 7

Далее в качестве алгоритмов машинного обучения выбрали: метод опорных векторов, линейную и байесовская регрессия, метод к ближайших соседей. Мы свели признаки материалов, которые потенциально влияют на пластичность высокоэнтропийных сплавов, такие как энтальпия, энтропия и многие другие. Сплавы были отобраны из баз данных по высокоэнтропийным сплавам. Набор представляет собой таблицу, в которой указан химический состав и пластичность.

Слайд 8

Итак, на первом этапе эволюционного алгоритма был проведён расчёт точности метода опорных векторов 20 раз с целью получения оптимального числа признаков. Результатом стало построение графика точности метода опорных векторов для регрессии, который изображён на рис.4. Линия на графике показывает среднеквадратичную ошибку регрессора метода опорных векторов от числа признаков. Заметим, что при числе признаков равным 8 среднеквадратичная ошибка минимальна. Исходя из данного предположения выберем 8 признаков для решения поставленной задачи. Первоначально набор признаков материалов составляет 300 подмножеств, которые выбираются случайным образом. Эти 300 разных подмножеств являются родительским поколением для следующих. Для каждого подмножества признаков используется метод опорных векторов с rfb ядром.

Слайд 9

Таким образом, на левом рисунке. представлена гистограмма, на которой показана точность каждой модели машинного обучения для определённого набора подобранных признаков, которые отобраны с помощью эволюционного алгоритма. В нашем решении мы тренируем 2 модели и строим график зависимости точности регрессоров для тренировочного набора и во время перекрёстной проверки по мере увеличения определённого гиперпараметра. На правом рисунке показан процесс оценивания модели на тестовых данных до выбора гиперпараметров для метода опорных векторов.

Слайд 10

Итак, делая статистический анализ полученных признаков можно сделать вывод, что в 3-ёх моделях – присутствует энтальпия смещения, радиус атомов и электроотрицательность по Оганову. Из таблицы 2 видно, что самым оптимальным алгоритмом для решения поставленной задачи является метод ближайших соседей.

Слайд 11

Далее с целью выявления сильно взаимосвязанных признаков были построены матрицы корреляции для 4 алгоритмов машинного обучения, которые показаны на рисунке.

Слайд 12

В свою очередь, учитывая наши найденные оптимальные признаки и модели машинного обучения был произведён расчёт, с целью тестирования модели для предсказания пластичности новых выплавленных высокоэнтропийных сплавов. Химический состав сплавов, а также результаты расчёта их пластичности приведены в таблице.

Слайд 13

Таким образом, анализ пластичности выплавленных сплавов с полученными теоретическими значениями показало, что может предсказывать пластичности в рамках вышеприведённых стандартных отклонений. Задачу считаю выполненной, но для дальнейшего улучшения точности предсказания моделей необходим более детальный анализ. В частности, необходимо учитывать фазовый состав сплава, его микроструктуру, взаимное расположение частиц, а также плотность дислокаций.

Слайд 14

Таким образом, Цель работы достигнута.

Спасибо за внимание! Доклад окончен.