

## ОГЛЯД ЗАСТОСУВАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА МАШИННОГО НАВЧАННЯ У ПРИКЛАДНІЙ МЕХАНІЦІ

М. П. Голубовський\*, В. П. Ясній

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя;  
46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56; e-mail: m.holubovskiy@gmail.com

Розвиток інформаційних технологій, обчислювальних потужностей і поява нових методів опрацювання великих об'ємів даних призвели до виникнення нової парадигми – науки, що базується на великих даних. Основними підходами для роботи з великими даними є штучний інтелект і машинне навчання. Їх застосування дозволяє комп'ютерним програмам на основі вхідних даних робити висновки і передбачення, виокремлювати з них корисну інформацію. Застосування штучного інтелекту та машинного навчання в області прикладної механіки дозволяє значним чином розширити можливості для проведення досліджень та реалізації практичних задач. Метою роботи є огляд можливостей застосування методів ШІ та МН для вирішення проблем зі сфери прикладної механіки, а також викладення міркувань щодо реалізації процесу дослідження з використанням МН, важливості попередньої підготовки, обробки даних для успішного застосування методів у дослідженнях. У огляді наведено визначення для машинного навчання та штучного інтелекту, проаналізовано типову процедуру та основні принципи проведення дослідження з використанням МН, основні алгоритми та послідовність проведення дослідження з їх використанням, регресійні моделі, методи класифікації та кластеризації. Розглянуто вимоги дотримання передумов щодо об'єму, повноти та правдивості даних, що використовуються у дослідженні. Описано процеси збирання даних дослідження, етапи їх обробки та підготовки, наведено фактори, які впливають на вибір моделі. Розглянуто процеси тренування моделі та оцінки її поведінки і продуктивності. Проведено огляд досліджень зі сфери прикладної механіки, де застосовувалися методи штучного інтелекту або машинного навчання. Зокрема, проаналізовано застосування методів для виявлення дефектів виробництва, оцінювання якості виробництва, автоматизації процесів виробництва, моніторингу стану конструкцій, досліджень у сфері механіки руйнування та матеріалознавства. Зроблено висновки щодо причин поширення застосування методів МН та ШІ у дослідженнях в сфері прикладної механіки, наведено домінуючі підходи. Наголошено на важливості вирішення викликів, пов'язаних з обсягом та якістю даних дослідження, застосуванню технік попередньої обробки через їх вирішальну роль при реалізації МН.

Ключові слова: прикладна механіка, машинне навчання, штучний інтелект, механіка руйнування, матеріалознавство.

The development of information technology, computing power and the emergence of new methods for processing large amounts of data have led to the emergence of a new paradigm - Big Data Science. The main approaches to working with big data are artificial intelligence and machine learning. Their use allows computer programs to make inferences and predictions based on input data, and to extract useful information from it. The use of artificial intelligence and machine learning in the field of applied mechanics can significantly expand the possibilities for conducting research and solving practical problems. The purpose of this paper is to review the possibilities of applying AI and ML methods to solve problems in applied mechanics, and to present considerations for the implementation of the research process using ML, the importance of preliminary preparation, and data processing for the successful application of methods in research. The review provides definitions for machine learning and artificial intelligence, analyses the typical procedure and basic principles of conducting research using ML, the main algorithms and the sequence of research using them, regression models, classification and clustering methods. It considers the requirements for the volume, completeness and reliability of the data used in the study. The article describes the processes of collecting research data, the stages of its processing and preparation, and the factors that influence the choice of a model. The processes of training the model and evaluating its behavior and performance are considered. A review of research in applied mechanics using artificial intelligence or machine learning methods is carried out. In particular, the article analyses the use of methods in manufacturing defect detection, manufacturing quality assessment, manufacturing process automation, structural health monitoring, and fracture mechanics and materials science research. Conclusions are drawn on the reasons for the proliferation of the use of ML and AI methods in applied mechanics research, and the dominant approaches are presented. The importance of addressing the challenges related to the volume and quality of research data and the use of preprocessing techniques is emphasised due to their crucial role in the implementation of ANN.

Keywords: applied mechanics, machine learning, artificial intelligence, fracture mechanics, material science.

### Вступ

Останні два десятиліття характеризуються значним розвитком інформаційних технологій, обчислювальних потужностей і появою нових прогресивних методів опрацювання великих об'ємів даних. Використання даних інструментів для проведення наукових досліджень є фактором появи того, що автори [1] називають виникненням нової парадигми – науки, яка базується на великих даних. Основний підхід для роботи з великими даними, що дозволяє на їх основі комп'ютерним програмам робити висновки і передбачення, виокремлювати з них корисну інформацію, має назву машинне навчання. Поява нових підходів та інструментів значним чином впливає і на прогрес у сфері прикладної механіки. Їх застосування надає переваги порівняно з традиційними підходами експериментального дослідження та чисельного моделювання, воно дозволяє покращити якість передбачення, скоротити цикл проведення дослідження та вартість обчислень. Застосування методів на основі машинного навчання (МН) та штучного інтелекту (ШІ) стало одним з найбільш перспективних підходів для прогнозування властивостей матеріалів та пошуку нових матеріалів, для проведення досліджень у сфері механіки руйнування.

Машинне навчання, що є підрозділом штучного інтелекту – галузь, що особливо стрімко розвивається останнім часом. В основі роботи моделей МН лежить використання статистичних алгоритмів. Завдяки своїм потужним можливостям щодо обробки даних та відносно низькому порозу входження для науковця, МН може ефективно зменшити людські затрати та матеріальні витрати на проведення дослідження. Методи машинного навчання не мають альтернативи у випадках, коли проведення дослідження вимагає обробки великих об'ємів даних, аналізу та розпізнавання зображень, побудови прогностичних моделей з багатьма входними змінними.

Використання штучного інтелекту та машинного навчання, підходів та інструментів, які їх реалізують, відіграватиме все більшу роль для досліджень у сфері прикладної механіки. Цьому сприятиме розробки нових алгоритмів, доступність якісних публічних наборів даних з різноманітними відомостями та результатами експериментів і розвиток інформаційних технологій.

Існуючі огляди застосування методів ШІ та МН фокусуються на вирішенні окремих задач, без проведення аналізу потенціалу їх застосувань для усієї області прикладної

механіки. Не було описано вирішальну роль таких факторів, як підготовка, якість даних та техніки попередньої їх обробки при реалізації МН. Для заповнення даних прогалин у даній роботі розглянуто застосування ШІ та МН у різних областях прикладної механіки. Розглянуто шість областей прикладної механіки: виявлення дефектів виробництва, оцінювання якості виробництва, автоматизації процесів виробництва, моніторингу стану конструкцій, досліджень у сфері механіки руйнування та матеріалознавства. Вибрані теми дозволяють репрезентувати значну частину проблем зі сфери прикладної механіки. У огляді наведено детальні міркування щодо реалізації процесу дослідження з використанням МН, розглянуто етапи попередньої підготовки, обробки даних. Описано існуючі проблеми та перспективні майбутні напрямки використання підходів на основі даних у цій галузі.

**Метою роботи** є огляд можливостей застосування методів ШІ та МН для вирішення проблем зі сфери прикладної механіки, а також викладення міркувань щодо реалізації процесу дослідження з використанням МН, важливості попередньої підготовки, обробки даних для успішного застосування методів у дослідженнях.

### Виклад основного матеріалу

Штучний інтелект (ШІ) – це широкий розділ інформатики, що досліджує розробку комп'ютерних програм зі здатністю до розпізнавання мови, аналізу та розуміння інформації, навчання на основі даних та загалом виконання завдань, що зазвичай вимагають людського інтелекту.

Машинне навчання (МН), що є підмножиною штучного інтелекту, здійснило революцію у сфері обчислень, дозволивши комп'ютерним програмам автономно вирішувати задачі та робити передбачення. Цей підхід не потребує явного задання алгоритму роботи програми людиною, програма самостійно вдосконалюється аналізуючи великі об'єми входних даних. При розробці таких алгоритмів вважається, що їх продуктивність буде покращуватися з часом, результати ставатимуть точнішими після опрацювання більшого об'єму даних. Традиційний підхід до програмування передбачає, що для виконання певної задачі комп'ютер покроково виконує певний набір інструкцій. На противагу, при використанні МН, машині надається набір даних та кінцева задача. Алгоритм розв'язку

будується автоматично, на основі даних. Можливість навчатися, робити узагальнення з даних робить МН потужним та універсальним інструментом. На сьогодні він є рушієм для багатьох найбільш технологічних досягнень сфери інформаційних технологій. До них відносяться такі різноманітні та складні системи, як голосові асистенти, чат-боти, системи рекомендації, автономні автомобілі, програми розпізнавання зображень та системи, що надають предикативну аналітику.

Машинне навчання поділяють на декілька видів [2]. Кероване навчання (Supervised learning) передбачає, що моделі навчаються на основі наперед розмічених даних, що дозволяє їм будувати передбачення. Некероване навчання (Unsupervised learning) використовується для пошуку структур та патернів, корисної інформації у нерозмічених даних [3]. Окремо виділяють навчання з підкріпленням (Reinforcement learning).

Кероване навчання є найбільш поширеним типом машинного навчання. Його використання передбачає навчання моделі на попередньо розмічених даних. Такі мітки можуть мати довільне значення - від категорії об'єкту до певного числового значення. Модель вивчає відношення між вводом (певною ознакою (feature)) та виводом, тобто міткою (label). Після тренування модель може передбачати значення виводу для нових, раніше небачених даних. Типовими прикладами алгоритмів керованого навчання є лінійна регресія для вирішення проблеми регресійного аналізу та логістична регресія, дерева прийняття рішень (decision trees) і метод опорних векторів, що використовуються для задач класифікації.

Методи некерованого навчання використовують для роботи у нерозмічених наборах даних. Вони дозволяють виокремити певні патерни та відношення у даних без втручання людини. Цей тип машинного навчання часто використовують для вирішення задач поділу на кластери (clustering) та зменшення розмірності (dimensionality reduction). Поділ на кластери або просто кластеризація передбачає групування елементів певної вибірки таким способом, щоб встановити їх приналежність до певних класів, встановити спорідненість значень. Зменшення розмірності застосовується для зниження кількості випадкових значень, шуму, отримання множини важливих значень із вибірки.

Навчання з підкріпленням – це тип машинного навчання, який розглядає задачу прийняття рішень автономної програми (агента) на основі взаємодії з середовищем. Ціллю такої системи є максимізація винагороди, оскільки кожна дія агента оцінюється на основі зворотного зв'язку з середовищем. На відміну від керованого чи некерованого навчання, навчання з підкріпленням підходить для вирішення задач, при яких дані є фрагментованими, а рішення, прийняте не кожному з кроків, впливає на майбутній результат [4]. Прикладом задач, які вирішують з використанням навчання з підкріпленням, є автономні роботизовані системи, розпізнавання мови, системи рекомендацій.

#### *Регресійні моделі*

Регресійні моделі – це клас методів у статистиці та машинному навчанні, які використовуються для прогнозування значень неперервної залежної змінної на основі однієї або більше незалежних змінних [5]. Основна мета регресійних моделей полягає у встановленні функціонального відношення між вхідними (незалежними) та вихідними (залежними) змінними. У регресійних моделях вихідна змінна є числовою та неперервною, і модель намагається знайти оптимальну функцію, яка якомога краще всього описує залежність між вхідними та вихідними змінними. Найпростішим варіантом реалізації регресійної моделі є лінійна регресія. При використанні лінійної регресії взаємозв'язок між шуканою змінною та вхідними даними моделюється за допомогою лінійних функцій. Множинна лінійна регресія (Multiple Linear Regression) є розширенням лінійної де залежна змінна може бути виражена як лінійна комбінація незалежних змінних з додатковими коефіцієнтами (вагами), які відображають вплив кожної змінної. Регресія на основі опорних векторів (Support Vector Regression, SVR) – це метод машинного навчання, що є варіацією методу опорних векторів (Support Vector Machine, SVM), і адаптований для задач прогнозування неперервних значень, а не дискретних. Основна ідея SVR полягає в тому, щоб знайти функцію, яка максимально віддалена від набору даних (відомих як опорні вектори), та при цьому не перевищує встановленої межі відхилення. У випадку регресії ці межі відхилення визначають, наскільки далеко можуть відхилитися передбачення функції від реальних значень. Одна з переваг SVR полягає в тому, що модель

може працювати з нелінійними залежностями між вхідними та вихідними змінними та з даними, які мають велику кількість ознак або розмірність. Логістична регресія (Logistic Regression) – це метод, який використовується у задачах бінарної класифікації, де потрібно розділити дані на дві категорії на основі вхідних змінних.

### Методи класифікації та кластеризації

Метою задач класифікації у МН є побудова моделей, які на основі закономірностей у даних, взаємозв'язків між вхідними ознаками, може передбачати приналежність об'єктів до певних категорій (класів). Задача кластеризації полягає у пошуку прихованих закономірностей у даних, патернів, на основі яких можна розподілити вибірку на певні наперед невідомі класи.

Наївний Байєсівський класифікатор (Naive Bayes) – метод машинного навчання, який використовує теорему Байєса для класифікації об'єктів на основі ймовірностей їх входження у певні класи. Він базується на припущенні про "наївність", тобто про незалежність між ознаками у заданому класі, що робить його простим для реалізації та швидким у виконанні. Основна ідея застосування методу полягає в тому, щоб визначити ймовірності входження об'єкта у кожен клас на основі ймовірностей входження його ознак у цей клас. Для класифікації нового об'єкта обчислюються ймовірності входження його ознак у кожен клас, а потім використовуються ці ймовірності для прийняття рішення про присвоєння об'єкта до певного класу.

Алгоритм k-найближчих сусідів (k Nearest Neighbors, k-NN) використовується для класифікації і регресії на основі схожості між об'єктами. Основна ідея полягає в тому, щоб визначити приналежність до класу або передбачити значення змінної на основі значень найближчих до неї об'єктів у навчальному наборі даних. Для класифікації нового об'єкта спочатку знаходяться k найближчих до нього об'єктів з навчального набору даних, а потім визначається клас, який найчастіше зустрічається серед цих k сусідів.

Дерева прийняття рішень (Decision Tree) – модель класифікатора, що використовує структуру, схожу на дерево, для прийняття рішення про приналежність до певного класу. Кожне дерево складається з вузлів, які є функціями, що оцінюють значення певної ознаки. В залежності від отриманого значення об'єкт оцінювання переходить до одного з дочірніх вузлів. Результатом виконання таких

оцінювань є розподіл набору даних на підгрупи, допоки не буде досягнуто кінцевого значення – приналежності об'єкту до певного класу.

DBSCAN – найпоширеніший алгоритм кластеризації, який дозволяє виявляти кластери різної форми та розміру у наборах даних з шумами та аномаліями і не вимагає заздалегідь визначеного числа кластерів. Основна ідея методу полягає у тому, щоб обчислити густину точок навколо кожної точки у просторі. Визначаються точки, що є ядром, та точки, розташовані найбільш щільно, і формують кластери. Точки, які лежать в областях з невеликою щільністю (чиї сусіди розташовані занадто далеко), позначаються як викиди.

### Послідовність реалізації МН

Проведення дослідження з використанням МН вимагає дотримання певних передумов та послідовності проведення етапів дослідження. Основними передумовами для ефективного використання МН є великий об'єм, повність і правдивість даних [6]. Послідовність проведення дослідження:

#### 1. Збирання даних

Якість та кількість даних безпосередньо впливає на точність та якість передбачення моделі. Дані для проведення тренування можна отримати з різних джерел. Вони можуть бути представлені у вигляді текстових файлів, зображень, баз даних, або публічних колекцій даних. Загалом виділяють три найпоширеніших механізми отримання даних для проведення досліджень. Перший варіант – використання відомостей з профільних публікацій. Перевагою цього підходу є релевантність таких даних до області дослідження, наявність відомостей про їх походження та напрямок можливого застосування. Другий варіант – проведення експериментів та використання традиційних обчислювальних моделей. Іншим варіантом є використання публічних баз даних. Після збирання даних їх потрібно підготувати для роботи, перетворити у структурований формат та перевірити їх релевантність до поставленої задачі.

#### 2. Попередня обробка даних

Попередня обробка є важливим етапом у процесі машинного навчання. Він дозволяє покращити якість даних та забезпечити коректну їх інтерпретацію моделлю. До цього етапу відноситься очистка даних (data cleaning), тобто видалення дублікатів, виправлення помилок, обробка відсутніх, пропущених відомостей (їх видалення або доповнення) та

нормалізація даних. Під нормалізацією розуміється процес приведення відомостей до стандартизованого формату. Дані, отримані у результаті проведення експериментів або комп'ютерних симуляцій, зазвичай, неповні, містять шуми та мінливі, тому для них обов'язковим є проведення очищення. Очищення даних проводиться шляхом заповнення відсутніх значень, виправлення невідповідностей та згладжування шуму. Такі процедури можна проводити вручну. Для внесення пропущених відомостей використовують константні або середні значення для атрибутів того ж типу. Та найбільш ефективним є автоматизоване опрацювання з використанням статистичних методів групування (binning), регресії та кластеризації.

Ключовим етапом підготовки даних у МН є конструювання ознак (feature engineering). Цей процес включає як відбір певних значущих для передбачення ознак (feature selection), так і побудову похідних ознак (feature extraction). Результатом його виконання є виокремлення важливих для дослідження ознак (дескрипторів) із необроблених даних та перетворення їх у формат, придатний для опрацювання моделями МН. Процес конструювання ознак є трудомісткими і, зазвичай, виконується вручну. Проте, за останні декілька років було зроблено багато спроб автоматизувати конструювання ознак. Це дозволяє автоматично виділяти нові потенційні ознаки на основі даних та відбирати з них найбільш придатні для навчання моделі.

### 3. Вибір моделі

Існує багато типів моделей машинного навчання. До найпопулярніших відносяться лінійна регресія, дерева прийняття рішення і нейронні мережі. Вибір моделі залежить від природи даних та проблеми, яку потрібно вирішити. До факторів які враховуються при виборі моделі належать розмір набору даних та їх тип, складність проблеми та обсяг доступних для моделювання обчислювальних ресурсів. Вибір необхідного алгоритму є одним із основних кроків при побудові системи з машинним навчанням, оскільки він впливає на точність кінцевого передбачення та здатність до узагальнення. Кожна з моделей має власну сферу застосування і не існує універсального рішення для розв'язку усіх проблем.

### 4. Тренування моделі

Процес тренування моделі включає зчитування даних та налаштування її внутрішніх параметрів для досягнення

максимальної якості передбачення. На цьому етапі важливо уникнути перенавчання (overfitting), тобто поведінки, при якій модель добре працює на даних, що використовувалися для навчання, але погано - на нових даних. Інший можливий негативний сценарій – недонавчання (underfitting), тобто, поведінка, при якій модель дає поганий результат і на тренувальних, і на нових даних.

### 5. Оцінка моделі

Після тренування моделі обов'язковим етапом є оцінка її поведінки. Цей процес передбачає тестування роботи на нових даних, що не використовувалися у процесі тренування. Для оцінки роботи моделі використовують ряд усталених метрик. Це може бути точність (accuracy) для задач класифікації, влучність і повнота (precision and recall) - для бінарної класифікації та середньоквадратична похибка (mean squared error) для регресійних задач [7].

### 6. Налаштування гіперпараметрів та оптимізація

Оцінивши результати роботи моделі може знадобитися налаштування гіперпараметрів для покращення результатів. Цей процес називають налаштуванням параметрів або оптимізацією гіперпараметрів. До технік налаштування параметрів відносять пошук по сітці (grid search) та випадковий пошук (randomized search). Пошук по сітці передбачає перебір усіх можливих комбінацій параметрів з метою оцінки їх впливу на якість передбачення, а випадковий пошук – перевірку певної заданої кількості комбінацій, вибраних випадковим чином.

### 7. Передбачення та розгортання

Після того, як модель натренована та оптимізована, вона вважається готовою для побудови передбачень. Цей процес передбачає запуск моделі на нових даних та використання її висновків для прийняття рішень чи подальшого аналізу. Під розгортанням моделі розуміють її використання у реальному середовищі, де вона працює зі справжніми даними та надає висновки у реальному часі.

## **Застосування ШІ та МН у прикладній механіці**

Штучний інтелект та машинне навчання застосовують для вирішення широкого кола задач у сфері прикладної механіки. Ці технології використовують у виробництві для виявлення дефектів, оцінюванні якості, автоматизації процесів та підвищення безпеки виробничих середовищ [8]. Вони надають інструменти для оптимізації процесів,

прогнозування поведінки складних систем і аналізу великих обсягів даних. Крім того, дані методи все частіше використовуються для вирішення складних проблем машинобудування, зокрема, у сфері механіки руйнування, де їх застосування є вирішальним фактором для покращення якості моделювання [9].

*Моніторинг стану конструкцій та прогнозує обслуговування*

ШІ та МН активно застосовують для моніторингу стану конструкцій та прогнозує обслуговування. Такі моделі можуть використовуватися для аналізу даних з давачів конструкцій, машин (наприклад, мостів, будівель, літаків) для виявлення аномалій або пошкоджень. Тобто виявляти пошкодження, тріщини, корозію або втому до того, як вони стануть критичними.

У роботі [10] було запропоновано підходи до відбору ознак для тренування моделей для виявлення пошкоджень інженерних конструкцій. Отримані в результаті експериментального дослідження сигнали прискорення були використані для тренування, тестування та прогнозування можливих пошкоджень. Для виявлення та локалізації пошкоджень використовувались бінарні класифікаційні моделі. Оцінка тяжкості пошкодження проводилась з допомогою класифікаційних моделей. Загалом, було натреновано 20 нейронних та рекурентних нейронних мереж з використанням різних ознак та їх комбінацій, досягнуто точності передбачення понад 80%.

Класифікація дефектів виробництва є важливим фактором для їх виявлення та аналізу причин, що до них призводять. Вчасне виявлення дефектів дозволяє зменшити частоту їх прояву у кінцевому продукті. Для розробки класифікатора поверхневих дефектів сталевого металопрокату та програми для визначення дефектів на основі зображень автори роботи [11] використали тисячі зображень різних дефектів. На їх основі було натреновано нейронну мережу для визначення дефектів на нових, раніше не аналізованих системою зображеннях та класифікування їх з високою точністю. Точність класифікації на основі тестових даних становила 97%, модель виявляла 89% відсотків зображень з дефектами.

Алгоритми МН можуть бути застосовані для передбачення потреби в технічному обслуговуванні на основі історичних даних, зменшуючи час простою та витрати, пов'язані з непередбачуваними неполадками. Науковці

досліджували різні підходи щодо можливості застосування машинного навчання для прогнозує обслуговування в різноманітних індустріях.

В останні роки спостерігався значний сплеск використання керованих інтелектуальних систем для прогнозує обслуговування в залізничній галузі, де машинне навчання та методи глибокого навчання відіграли важливу роль [12]. Доведено, що інтеграція алгоритмів машинного навчання в стратегії прогнозованого технічного обслуговування покращує методи розробки надійності та оптимізує операції з технічного обслуговування. Використовуючи потужність та масштабованість штучного інтелекту, індустрії можуть завчасно вирішувати потреби в обслуговуванні та пом'якшувати вплив руйнівних подій на виробничі процеси [13].

Крім того, методи машинного навчання були застосовані для прогнозування несправностей та обслуговування електричних машин за допомогою підходів на основі аналізу спектру сигналу [14]. Ці методи передбачають навчання моделей машинного навчання на спектральних даних для прогнозування потенційних несправностей, що дозволяє впроваджувати проактивні заходи з обслуговування. Крім того, інтеграція машинного навчання із рамками прийняття рішень показала перспективу провадження прогнозує обслуговування, що виконується в режимі реального часу для насосних системи, де правильні дії з обслуговування повинні бути визначені та виконані швидко [15].

Загалом інтеграція машинного навчання в системи прогнозованого технічного обслуговування кардинально змінила підходи щодо стратегій технічного обслуговування. Використовуючи методи аналізу даних, штучного інтелекту та передові обчислювальні технології, організації можуть завчасно задовольняти потреби в обслуговуванні, скорочувати час простою та оптимізувати ефективність активів.

*Оптимізація проектування конструкцій*

Оптимізація топології є фундаментальним аспектом структурного проектування, що зосереджується на визначенні найефективнішого розподілу матеріалу в заданому проектному просторі для відповідності визначеним критеріям, зменшення ваги та використання матеріалу. Машинне навчання і штучний інтелект стали цінними інструментами в цій галузі, надаючи

інноваційні методи для покращення процесу оптимізації.

Зокрема, широко досліджувалося застосування методів МН у розробці та оптимізації полімерних композитів [16], для проектування та оптимізації структур метаматеріалів [17]. Машинне навчання також знайшло застосування при оптимізації конструкції різних компонентів машин, наприклад, імперелерів [18]. Дослідження продемонстрували переваги та потенціал методів машинного навчання для покращення оптимізації конструкції машин, їх універсальність для вирішення різних інженерних задач.

Навчання з підкріпленням було застосовано для автоматизації в сфері інженерного проектування [19]. У результаті було зроблено висновки про ефективність моделі при автоматизації часто повторюваних завдань проектування зі схожими вимогами.

Застосування МН у автоматизації виробництва дозволяє покращити процес прийняття рішень, виробничі процеси, загальну операційну ефективність. Проте, воно вимагає глибокого розуміння різних статистичних алгоритмів, високого професійного рівня інженера-розробника [20].

#### *Механіка руйнування*

Методи машинного навчання активно використовуються для досліджень у сфері механіки руйнування, вивчення зародження і розвитку дефектів у структурі матеріалів, неоднорідностей, тріщин, дислокацій, різноманітних включень при статичних і динамічних навантаженнях.

Досягнення та розвиток у сфері скануючих електронних мікроскопів відкрили нові можливості для дослідження структурних параметрів матеріалів і різних функціональних властивостей у реальному просторі з точністю до ангстрема. Такий розвиток привів до зростання розміру та якості отриманих даних з мікроскопів та спектроскопів. У результаті проявилася необхідність у застосуванні методів МН.

Зокрема, такі методи знайшли застосування для дослідження зародження і розвитку дефектів у металах. У роботі [21] було продемонстровано успішне застосування глибоких нейронних мереж для аналізу зображень з електронного мікроскопа з атомарною роздільною здатністю. У результаті було отримано модель зі здатністю визначати дефекти у атомній структурі металів на нових, раніше небачених даних.

МН активно застосовується для оцінки міцності та довговічності відповідальних елементів конструкцій. Традиційні методи для розв'язання таких задач потребують складних розрахунків. Нейронні мережі, методи SVM та k-найближчих сусідів знайшли своє застосування для розв'язання задач механіки руйнування і дозволяють досягти високої точності рішень [22]. Зокрема, проводилося дослідження щодо оцінки довговічності елементів конструкцій за допомогою прогнозування швидкості поширення росту втомних тріщин методами МН [23]. Отримані дані добре узгоджуються з експериментальними: нейронні мережі продемонстрували найкращу здатність до передбачення з точністю 99.5%.

Окрім прогнозування поширення тріщин, МН застосовується для розпізнавання втомних руйнувань. У роботі [24] було досліджено можливості щодо застосування ШІ для розпізнавання втомного руйнування з використанням згорткових нейронних мереж. Точність натренованої мережі досягала 95.4% для області поширення втомної тріщини, та 97,2% для області швидкого руйнування.

#### *Матеріалознавство*

Потреба у нових матеріалах для технологічного сектору, транспортної сфери, медицини, зеленої енергетики є постійно зростаючою. Сфера проектування нових матеріалів стикається з все більшими технологічними викликами, ускладненням вимог, що робить сплави складнішими для проектування, обробки та переробки. На даний час для дослідження і розробки нових матеріалів поширеним є проведення експериментів, що покладаються на метод проб та помилок, інтуїтивні здогадки дослідників і не є ефективними, а також вимагають певного досвіду та удачі для отримання бажаного результату. У даній області широко застосовуються методи, засновані на теорії функціонала густини (DFT). DFT-методи пройшли шлях від обмеженого застосування та приблизних результатів у фізиці твердого тіла до появи все точніших та більш передбачуваних методів. Ці методи зробили важливий внесок у розвиток хімії та матеріалознавства, широко застосовуються для пошуку та проектування матеріалів, конструювання ліків, сонячних панелей [25]. Однак, ефективність та точність таких методів часто обмежується значною обчислювальною потужністю, необхідною для їх проведення. У цьому контексті серед дослідників зростає

популярність використання штучного інтелекту для прискорення розробки інноваційних матеріалів. Поєднуючи або замінюючи з традиційним експериментальним дослідженням та обчислювальним моделюванням методи, МН можна використовувати для аналізу структури та прогнозування властивостей матеріалів, розробляти нові функціональні матеріали ефективніше та з більшою точністю.

Нові підходи та технології, використання штучного інтелекту і машинного навчання дозволяють автоматизовано шукати нові матеріали та прогнозувати їх властивості. Зокрема, у результаті дослідження [26] з використанням машинного навчання було передбачено будову та властивості 2.2 мільйонів нових матеріалів. Результати дослідження були опубліковані у відкритий доступ. Такі бази даних потенційно містять цінні відомості, є публічно доступними для науковців і автоматизовані інструменти дослідження є незамінним для роботи з ними. З кожним роком експонентно зростає кількість даних, отриманих у ході експериментів. Одним із сценаріїв успішного застосування машинного навчання у матеріалознавстві є розробка повністю автоматизованих алгоритмів для опрацювання результатів високопродуктивних експериментів (High-throughput experiments (HTS)). У сфері матеріалознавства МН знайшло застосування у дослідженнях щодо відкриття нових матеріалів, прогнозування властивостей матеріалів та молекулярних властивостей, досліджень у галузі квантової хімії. Для прогнозування властивостей матеріалів, зазвичай, використовують методи регресійного аналізу, що дозволяють передбачати як макроскопічні, так і мікроскопічні властивості. В основі застосування МН при такому підході лежить ідея застосування ймовірної моделі (probabilistic model) для перебору різних комбінацій структур та компонентів, щоб обрати матеріал з оптимальними характеристиками з набору кандидатів, здійснивши перевірку на основі теорії функціонала густини (DFT).

#### *Прогнозування властивостей матеріалів*

Механічні та фізико-хімічні властивості матеріалів можуть бути описані на макроскопічному або мікроскопічному рівні. Існує два поширених методи дослідження властивостей матеріалів – комп'ютерне моделювання та обробка експериментальних даних. Використання цих методів передбачає складні обчислення та тривалу підготовку експериментів. Досить важко побудувати

комп'ютерну симуляцію, яка враховуватиме складні зв'язки між властивостями матеріалу, та факторами, які на них впливають. Окремі з цих зв'язків можуть навіть бути невідомими. Експерименти, які проводяться для оцінювання властивостей, зазвичай, виконуються на пізніх стадіях відбору матеріалів. У результаті при незадовільних результатах часові витрати та ресурси можуть виявитися даремними. Ці фактори свідчать про те, що існує потреба у розробці автоматизованих моделей передбачення властивостей матеріалів, які б характеризувалися низькими часовими і обчислювальними затратами. Машинне навчання дозволяє реалізовувати алгоритми, які можуть автономно знаходити шаблони у даних. Основна ідея застосування машинного навчання для прогнозування властивостей матеріалів полягає у пошуку зв'язків між властивостями матеріалу та пов'язаними з ними факторами шляхом аналізу емпіричних даних.

Прикладом використання МН для передбачення властивостей матеріалів є робота [27], в якій автори розробили інструмент для побудови моделей МН, здатних передбачати властивості неорганічних кристалічних матеріалів. Виконання прогнозування передбачало отримання вектора ознак шляхом відсіювання ознак з низькою дисперсією та високою кореляцією. Автори використали метод дерев прийняття рішень з градієнтним підсиленням (Gradient Boosting Decision Tree (GBDT)), для того, щоб спочатку класифікувати матеріал-кандидат як метал чи ізолятор. У випадку, якщо матеріал не є металом, обчислювалась енергія забороненої зони. Незалежно від приналежності матеріалу прогнозувалося шість термомеханічних властивостей: модуль всебічного стиску, модуль зсуву, температура Дебая, теплоємність за постійного тиску, теплоємність за постійного об'єму та коефіцієнт теплового розширення. Перед навчанням моделі для розділення набору даних використовувалося п'ятикратна перехресна перевірка (cross-validation). Для оцінки точності прогнозування моделей застосовувалися ROC-крива, корінь з середньоквадратичної помилки (RMSE), середня абсолютна помилка (MAE) та коефіцієнт детермінації ( $R^2$ ).

Дослідження макроскопічних характеристик матеріалів здебільшого полягає у пошуку взаємозв'язків між макроскопічними (механічними та фізичними) властивостями матеріалу та його мікроструктурою. Завдяки їх



хорошій продуктивності у розв'язанні проблем регресії та класифікації, моделі машинного навчання, такі як нейронні мережі і метод опорних векторів (SVM) у поєднанні з алгоритмами оптимізації, широко застосовуються для прогнозування макроскопічних властивостей матеріалів.

У сфері МН нейронні мережі – це сімейство моделей, структура яких була натхненна біологічними нейронними мережами. Вони використовуються для вирішення задач з побудови наближення функції або отримання значення для функцій, що залежить від багатьох вхідних даних і є, як правило, невідомою. Нейронні мережі використовуються як механізм статистичного аналізу з потужними можливостями самонавчання та адаптації. Нейронні мережі зі зворотнім зв'язком знайшли застосування для прогнозування властивостей матеріалів, таких як вплив температури, розтяг, втрати, корозія і компресійна міцність [28], [29], [30]. Мережа радіальних базисних функцій (RBF-ANN) знайшла застосування при дослідженні поширення тріщин у багатошарових бітумних конструкціях [31]. Крім цього, моделювання з використанням нейронних мереж знайшло застосування у для передбачення температур плавлення, енергії збудженого стану та інших функціональних властивостей [32].

Макроскопічні характеристики матеріалів визначаються їх мікроскопічною будовою, включаючи атомну на молекулярну будову. Застосування МН для дослідження мікроскопічних властивостей використовувалося для дослідження періоду кристалічної ґратки, забороненої зони, спорідненості до електрона і енергії розриву хімічного зв'язку. У роботі [33] було виділено п'ять методів машинного навчання включаючи лінійну регресію, гребеневу (ridge) регресію (LRR), гребеневу регресію з ядром (kernel ridge regression, KRR), опорно-векторну регресію (SVR), метод k-найближчих сусідів (KNN) та нейронні мережі і досліджено вплив молекулярного представлення на ефективність їх роботи. Було виявлено, що усі методи дозволяють виконувати квантово-хімічні обчислення за лічені секунди.

Для покращення швидкості виконання та точності передбачення при застосування методів МН для прогнозування енергій ширини забороненої зони і здатності до склування неорганічних речовин у роботі [34] було запропоновано три ключових стратегій. По-перше, було створено набір загальних

атрибутів, що складався з 145 властивостей, які ефективно описували властивості матеріалів. По-друге, використовувався ансамблевий метод для того, щоб нівелювати недоліки кожного окремого методу МН. По третє, було використано стратегію поділу вибірки, коли елементи з набору даних були згруповані на підмножини хімічно-схожих речовин, а моделі навчалися на кожній окремій підмножині. У роботі [35] автори продемонстрували, що методи МН, навчені на базі даних механічних властивостей матеріалів, отриманих з допомогою DFT обчислень можна використовувати для ефективного і точного передбачення мікроскопічних властивостей матеріалів.

Як видно з наведеного огляду, використання методів МН дозволяє отримати вищу точність та якість передбачення властивостей матеріалів у порівнянні з традиційними методами. Варто зазначити, що жоден із методів не є універсальним для всіх типів обчислень. Для вибору найкращого рішення завжди необхідно проводити порівняння різних методів. Одні з найкращих результатів були досягнені з використання ансамблевого методу, поєднуючи декілька різних методів, щоб нівелювати недоліки кожного з окремих. Очищення даних та проектування ознак є ключовими етапами побудови моделі, якісь їх реалізації значним чином впливає на точність передбачення, якість моделі.

#### *Опрацювання неструктурованих даних*

Багато даних з відомостями про матеріали доступні у вигляді неструктурованих документів, статей, звітів та таблиць, які публікувалися протягом багатьох років у різних джерелах. Для того, щоб надати доступ до таких джерел користувачам, виокремити дані та представити інтерфейс для реалізації запитів та завантаження, існують різноманітні інструменти, які працюють, використовуючи методи ШІ та МН.

Наприклад, Semantic Scholar надає пошук до більше 200 мільйонів наукових статей та моделі на основі ШІ, що дозволяють їх конвертацію, будують рекомендації щодо схожої літератури, дозволяють отримати відповіді на запитання щодо тематики робіт, згенеровані штучним інтелектом [36].

Таке рішення, як ChemDataExtractor, дозволяє користувачам добувати інформацію про хімічні властивості з наукових документів. Цей інструмент може виокремити назви сполук, властивості та спектри з тексту та

дозволяє імпортувати їх у базу даних або електронну таблицю [37].

Платформа IBM DeepSearch використовує моделі штучного інтелекту для пошуку наукових публікацій, конвертації та обробки даних з них. Її використання дозволяє зібрати дані з публічних, приватних, структурованих і неструктурованих джерел інформації. У рішенні використовуються моделі ШІ для перетворення PDF документів у структурований формат JSON. Інструмент може застосовувати обробку мови (тексту) та алгоритми комп'ютерного зору на документах для створення графів знань з можливістю пошуку [38].

*Використання породжувального штучного інтелекту (GAI)*

Породжувальний штучний інтелект (Generative Artificial Intelligence, GAI) – категорія моделей штучного інтелекту, які здатні генерувати текст, зображення, медіа різних форматів за критеріями користувача. Завдяки свої перевагам, можливості взаємодії з ШІ у форматі питання-відповідь, застосуванні навчання на основі зворотного зв'язку від людини, GAI здобуває все більшу популярність у сфері матеріалознавства. Використання GAI надає потужний інструментарій для вирішення математичних задач. У ході дослідження [39] було продемонстровано, що точність виконання диференціальних обчислень з використанням ChatGPT була рівна результатам спеціалізованих математичних пакетів.

Моделі на основі GAI дозволяють зручно досліджувати публічну інформацію, відкриті наукові роботи, ефективно збирати відомості з різноманітних літературних джерел.

Популярною сферою застосування породжувального ШІ є обробка різноманітних текстових даних, а також генерація програмного коду. GAI знайшов застосування для прогнозування властивостей матеріалів та дослідження нових матеріалів [40].

### Висновки

У роботі проведено огляд літератури щодо застосування штучного інтелекту та методів машинного навчання в сфері прикладної механіки. Дослідження стосувалося шести тематичних областей: виявлення дефектів виробництва, оцінювання якості виробництва, автоматизації процесів виробництва, моніторингу стану конструкцій, механіки руйнування та матеріалознавства. Описано принципи та послідовність проведення досліджень з використанням МН, основні методи і алгоритми реалізації МН. Для

кожної області було проведено огляд поточного стану застосування ШІ та МН у літературі. Аналіз літератури дозволив отримати уявлення щодо використання різних підходів МН (кероване та некероване навчання) методів класифікації, регресії, кластеризації, підходів щодо попередньої обробки даних у розглянутих областях прикладної механіки. Проведення аналізу літератури дозволило виявити виклики і обмеження, пов'язані з застосуванням розглянутих методів, а також актуальні напрями для майбутніх досліджень.

На основі результатів дослідження можна зробити висновок про зростаючу популярність застосування методів МН та ШІ у дослідженнях в сфері прикладної механіки. Ця тенденція пояснюється розвитком інформаційних технологій, обчислювальних ресурсів та розробкою прогресивних алгоритмів для вирішення статистичних задач. Поширення цифровізації сприяє доступності експериментальних даних, і, відповідно, розвитку моделей, що керовані даними. Дослідження показало, що домінуючими підходами МН для вирішення задач прикладної механіки є методи керованої класифікації. Також зростає інтерес до використання некерованих методів, що дозволяють подолати складнощі пов'язані із браком даних та незбалансованістю наборів. Все більше уваги приділяється підготовці, якості даних та технікам попередньої обробки через їх вирішальну роль при реалізації МН.

Попри великий потенціал застосування ШІ та МН для досліджень у сфері прикладної механіки, існують і певні виклики та обмеження. Для належної роботи моделі вимагають наявності великого обсягу даних для тренування. Отримання якісного набору даних має вирішальне значення для впровадження МН. Експериментальні дані або відомості, отримані у результаті моделювань, характеризуються високою вартістю отримання, неповністю та відсутністю узгодженості. Хоча поява відкритих баз матеріалів позитивно вплинула на можливість доступу до даних, часто вони не є повними, багато відомостей доступні тільки у вигляді різноманітних публікацій. Використання МН для аналізу текстів та збору даних з них є перспективним напрямом та дозволить розширити існуючі бази даних. Конструювання ознак значним чином впливає на якість реалізації МН. На даний час його правильне виконання вимагає кропіткої роботи та глибокого розуміння предметної області. Автоматизація конструювання ознак на основі

аналізу досліджуваних даних дозволить значно спростити роботу, виділяти можливі неявні характеристики. Цей напрям є актуальною сферою для майбутніх досліджень. Також застосування МН вимагає додаткової міждисциплінарної підготовки фахівців, оскільки вони повинні отримати знання та розуміння щодо основних концептів і можливостей та обмежень застосування різних методів.

Застосування методів МН дає змогу досліджувати складні, багатовимірні залежності, які неможливо описати традиційними статистичними моделями. Проте, результати таких досліджень є складно інтерпретовані, такі прогнози вимагають втручання експерта для проведення експериментальної або ручної перевірки, оцінки достовірності прогнозів. Проте, із подальшим розвитком методів, алгоритмів, обчислювальних потужностей МН дозволить вирішувати все різноманітніші та складніші задачі у сфері прикладної механіки.

### *Література / References*

1. Hansen C., Johnson C., Pascucci V., Silva C. The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery. 2009. C. 153–163. [https://doi.org/10.1007/978-3-642-33299-9\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-642-33299-9_1).
2. Veres O. M., Olyvko R. M. Klasyfikatsiia metodiv analizu Velykykh danykh, *Visnyk Natsionalnoho Universytetu «Lvivska Politekhnikha» «Informatsiini Systemy Ta Merezhi»*, 2018. Jun. P. 84. URL: [http://nbuv.gov.ua/UJRN/VNULPICM\\_2017\\_872\\_12](http://nbuv.gov.ua/UJRN/VNULPICM_2017_872_12) [In Ukrainian]
3. Wickramasinghe C. S., Amarasinghe K., Marino D. L., Rieger C., Manic M. Explainable Unsupervised Machine Learning for Cyber-Physical Systems. *IEEE Access*. 2021. Iss. 9. P. 131824–131843. DOI: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3112397>.
4. Sutton R. S., Barto A. G. Reinforcement learning: an introduction. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 2018. 526 c. ISBN 978-0-262-03924-6. <https://doi.org/10.1109/TNN.1998.712192>.
5. James G., Witten D., Hastie T., Tibshirani R. An introduction to statistical learning: with applications in R. New York, NY: Springer, 2021. 607 c. ISBN 978-1-07-161417-4. <https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1418-1>.
6. Guo K., Yang Z., Yu C.-H., Buehler M. J. Artificial intelligence and machine learning in design of mechanical materials. *Materials Horizons*. 2021. Vol. 8, Iss. 4. P. 1153–1172. <https://doi.org/10.1039/D0MH01451F>.
7. Hushchyn I. V., Sych D. O. Analiz vplyvu poperednoi obrobky tekstu na rezultaty tekstovoi klasyfikatsii. *Molodyi Vchenyi*, No 10(1), P. 264–266, 2018. URL: <https://www.molodyvchenyi.ua/index.php/journal/article/view/3755>. [In Ukrainian]
8. Artkin F. Applications of Artificial Intelligence in Mechanical Engineering. *European Journal of Science and Technology*. 2022. <https://doi.org/10.31590/ejosat.1224045>.
9. Wiangkham A., Aengchuan P., Kasemsri R., Pichitkul A., Tantrairatn S., Ariyarit A. Improvement of Mixed-Mode I/II Fracture Toughness Modeling Prediction Performance by Using a Multi-Fidelity Surrogate Model Based on Fracture Criteria. *Materials*. 2022. Vol. 15, Iss. 23. P. 8580. <https://doi.org/10.3390/ma15238580>.
10. Alemu Y., Lahmer T., Walther C. Damage Detection with Data-Driven Machine Learning Models on an Experimental Structure. *Eng*. 2024. Vol. 5. P. 629–656. <https://doi.org/10.3390/eng5020036>.
11. Konovalenko I., Maruschak P., Brevus V., Prentkovskis O. Recognition of Scratches and Abrasions on Metal Surfaces Using a Classifier Based on a Convolutional Neural Network. *Metals*. 2021. Vol. 11, Iss. 4. P. 549. <https://doi.org/10.3390/met11040549>.
12. Davari N., Veloso B., Costa G. D. A., Pereira P. M., Ribeiro R. P., Gama J. A Survey on Data-Driven Predictive Maintenance for the Railway Industry. *Sensors*. 2021. Vol. 21, Iss. 17. P. 5739. <https://doi.org/10.3390/s21175739>.
13. Peres R. S., Dionisio Rocha A., Leitao P., Barata J. IDARTS – Towards intelligent data analysis and real-time supervision for industry 4.0. *Computers in Industry*. 2018. Vol. 101. P. 138–146. <https://doi.org/10.1016/j.compind.2018.07.004>.
14. Raja H. A., Kudelina K., Asad B., Vaimann T., Kallaste A., Rassõlkin A., Khang H. V. Signal Spectrum-Based Machine Learning Approach for Fault Prediction and Maintenance of Electrical Machines. *Energies*. 2022. Vol. 15, Iss. 24. P. 9507. <https://doi.org/10.3390/en15249507>.
15. Khorsheed R. M., Beyca O. F. An integrated machine learning: Utility theory framework for real-time predictive maintenance in pumping systems. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B. *Journal of Engineering Manufacture*. 2021. Vol. 235, Iss. 5. P. 887–901. <https://doi.org/10.1177/0954405420970517>.
16. Maniraj J., Arockiasamy F. S., Kumar C. R., Kumar D. A., Jenish I., Suyambulingam I., Rangappa S. M., Siengchin S. Machine Learning Techniques for the Design and Optimization of Polymer Composites: A Review. *E3S Web of*

- Conferences*. 2023. Vol. 428. P. 02013. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202342802013>.
17. Soni M., Misra S. Machine-Learning-Assisted Design of Multiband Terahertz Metamaterial Absorber. *ACS Applied Optical Materials*. 2023. Vol. 1, Iss. 10. P. 1679–1687. <https://doi.org/10.1021/acsaom.3c00246>.
18. Zhang A., Liu Y., Yang J., Li Z., Zhang C., Li Y. Shenyang Blower Works Group Machine Learning Based Design Optimization of Centrifugal Impellers. 2022. <https://doi.org/10.33737/gpps21-tc-235>.
19. Dworschak F., Dietze S., Wittmann M., Schleich B., Wartzack S. Reinforcement Learning for Engineering Design Automation. *Advanced Engineering Informatics*. 2022. Vol. 52. P. 101612. <https://doi.org/10.1016/j.aei.2022.101612>.
20. Koester M. Making Industrial Analytics work for Factory Automation Applications. Machine Learning for Cyber Physical Systems. Ред. Beyerer J., Kühnert C., Niggemann O. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2019. P. 116–122. [https://doi.org/10.1007/978-3-662-58485-9\\_13](https://doi.org/10.1007/978-3-662-58485-9_13).
21. Ziatdinov M., Dyck O., Maksov A., Li X., Sang X., Xiao K., Unocic R. R., Vasudevan R., Jesse S., Kalinin S. V. Deep Learning of Atomically Resolved Scanning Transmission Electron Microscopy Images: Chemical Identification and Tracking Local Transformations. *ACS Nano*. 2017. Vol. 11, Iss. 12. P. 12742–12752. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b07504>.
22. Yasnii O. P., Pastukh O. A., Pyndus Yu. I., Lutsyk N. S., Didych I. S. Prediction of the Diagrams of Fatigue Fracture of D16T Aluminum Alloy by the Methods of Machine Learning. *Materials Science*. 2018. Vol. 54, Iss. 3. P. 333–338. <https://doi.org/10.1007/s11003-018-0189-9>.
23. Yasniy O., Didych I., Lapusta Y. Prediction of fatigue crack growth diagrams by methods of machine learning under constant amplitude loading. *Acta Metallurgica Slovaca*. 2020. Vol. 26, Iss. 1. P. 31–33. <https://doi.org/10.36547/ams.26.1.346>.
24. Lyu Y., Yang Z., Liang H., Zhang B., Ge M., Liu R., Zhang Z., Yang H. Artificial intelligence-assisted fatigue fracture recognition based on morphing and fully convolutional networks. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*. 2022. Vol. 45, Iss. 6. P. 1690–1702. <https://doi.org/10.1111/ffe.13693>.
25. Schleder G. R., Padilha A. C. M., Acosta C. M., Costa M., Fazzio A. From DFT to machine learning: recent approaches to materials science – a review. *Journal of Physics: Materials*. 2019. Vol. 2, Iss. 3. P. 032001. <https://doi.org/10.1088/2515-7639/ab084b>.
26. Merchant A., Batzner S., Schoenholz S. S., Aykol M., Cheon G., Cubuk E. D. Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*. 2023. Vol. 624, Iss. 7990. P. 80–85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>.
27. Liu Y., Zhao T., Ju W., Shi S. Materials discovery and design using machine learning. *Journal of Materiomics*. 2017. Vol. 3, Iss. 3. P. 159–177. <https://doi.org/10.1016/j.jimat.2017.08.002>.
28. Isayev O., Oses C., Toher C., Gossett E., Curtarolo S., Tropsha A. Universal fragment descriptors for predicting properties of inorganic crystals. *Nature Communications*. 2017. Vol. 8, Iss. 1. P. 15679. <https://doi.org/10.1038/ncomms15679>.
29. Guo Z., Malinov S., Sha W. Modelling beta transus temperature of titanium alloys using artificial neural network. *Computational Materials Science*. 2005. Vol. 32, Iss. 1. P. 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2004.05.004>.
30. Altun F., Kişi Ö., Aydin K. Predicting the compressive strength of steel fiber added lightweight concrete using neural network. *Computational Materials Science*. 2008. Vol. 42, Iss. 2. P. 259–265. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2007.07.011>.
31. Topçu İ. B., Sarıdemir M. Prediction of properties of waste AAC aggregate concrete using artificial neural network. *Computational Materials Science*. 2007. Vol. 41, Iss. 1. P. 117–125. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2007.03.010>.
32. Salahinejad M., Le T. C., Winkler D. A. Capturing the Crystal: Prediction of Enthalpy of Sublimation, Crystal Lattice Energy, and Melting Points of Organic Compounds. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2013. Vol. 53, Iss. 1. P. 223–229. <https://doi.org/10.1021/ci3005012>.
33. Häse F., Valleau S., Pyzer-Knapp E., Aspuru-Guzik A. Machine learning exciton dynamics. *Chemical Science*. 2016. Vol. 7, Iss. 8. P. 5139–5147. <https://doi.org/10.1039/C5SC04786B>.
34. Hansen K., Montavon G., Biegler F., Fazli S., Rupp M., Scheffler M., Von Lilienfeld O. A., Tkatchenko A., Müller K.-R. Assessment and Validation of Machine Learning Methods for Predicting Molecular Atomization Energies. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2013. Vol. 9, Iss. 8. P. 3404–3419. <https://doi.org/10.1021/ct400195d>.

35. Ward L., Agrawal A., Choudhary A., Wolverton C. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. *npj Computational Materials*. 2016. Vol. 2, Iss. 1. P. 16028. <https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2016.28>.
36. Lo K., Wang L. L., Neumann M., Kinney R., Weld D. S. S2ORC: The Semantic Scholar Open Research Corpus. *arXiv*, 2019. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1911.02782>.
37. ChemDataExtractor. URL: <http://chemdataextractor.org/>.
38. Deep Search, IBM Research. URL: <https://research.ibm.com/projects/deep-search>.
39. Liu Y., Yang Z., Yu Z., Liu Z., Liu D., Lin H., Li M., Ma S., Avdeev M., Shi S. Generative artificial intelligence and its applications in materials science: Current situation and future perspectives. *Journal of Materiomics*. 2023. Vol. 9, Iss. 4. P. 798–816. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2023.05.001>.
40. Chen L., Zhang W., Nie Z., Li S., Pan F. Generative models for inverse design of inorganic solid materials. *Journal of Materials Informatics*. 2021. <https://doi.org/10.20517/jmi.2021.07>.