

ОРГАНІЗАЦІЯ ТА АНАЛІЗ ВЕЛИКИХ ОБ'ЄМІВ ДАНИХ У РОЗРОБЦІ МЕДИЧНИХ ТИТАНОВИХ СПЛАВІВ. ОРГАНІЗАЦІЯ ДОСТУПНОЇ БАЗИ ЗНАНЬ ТА ЗБІР ДАНИХ

Активний розвиток технологій створення і обробки металевих сплавів розширює площину для новинок у геометричній прогресії. Водночас виникає проблема адекватної обробки великих об'ємів даних, які ростуть в тому ж темпі або навіть швидше.

Особливої уваги вимагають титанові сплави, які активно впроваджуються в медицину завдяки своїм сприятливим властивостям: легкості, біосумісності, відсутності корозії та токсичності у чистого титана, високій міцності. Титан використовується у медичних інструментах (скальпелі, хірургічні щипці, шовні голки тощо), протезах та імплантатах для ортопедії та остеосинтезу, а також у допоміжному реабілітаційному обладнанні.

Зважаючи на користь медичних титанових сплавів, виникає необхідність активного розвитку та розширення їх застосування. Створення нових сплавів з покращеними властивостями не тільки вдосконалив медичну практику, а й розширить сферу їх використання.

Для ефективного пошуку нових сплавів та оптимізації існуючих необхідно зібрати та проаналізувати всі доступні дані. Першочергова проблема - трудомісткість та складність збору інформації з нуля. Тому як початкові дані можна використати доступні онлайн-бази, такі як Materials Project, OQMD, AFLOW, JARVIS. Більшість із них надають API для програмної взаємодії. При цьому постає проблема неоднорідності форматів даних, що вимагає їх зведення до єдиного стандарту.

Основні критерії відбору даних та вибору складу сплаву: мінімізація токсичності та корозії, оптимізація ваги та габаритів виробів, релевантність технологій обробки за співвідношенням ціна/якість.

Перед використанням дані мають бути очищені, інтегровані, проріджені та перетворені для підвищення їх якості. Після цього можна застосовувати методи машинного навчання: лінійну регресію, стохастичний градієнтний спуск, опорно-векторну регресію, дерева рішень, випадковий ліс, AdaBoost, градієнтний бустинг, нейронні мережі. Перспективним є ансамблювання методів: бустинговий, беггінговий чи стекінговий підхід. Для визначення оптимальних параметрів сплавів

необхідно враховувати вимоги застосування, біосумісність, корозійну стійкість, механічні властивості, методи обробки та вартість.

Для зберігання даних найкраще підходить реляційна база даних з 1-2 основними таблицями і допоміжними таблицями для громіздких параметрів. Її можна реалізувати засобами MySQL, MariaDB, Microsoft Access. Після формування бази даних стане можливим виконувати запити за бажаними характеристиками для визначеної мети та отримувати найбільш відповідні сплави. Використання машинного навчання дозволить прогнозувати властивості нових сплавів за їх складом.

Важливість роботи підкріплюється реальними застосуваннями титанових сплавів: імпланти, хірургічні інструменти, ортопедичні пристрої, зубні імпланти. Використання титанових сплавів прискорює інновації та знижує вартість розробки нових медичних виробів завдяки їх міцності, легкості, корозійній стійкості, біосумісності та сучасним методам виробництва. Розвиток інформаційних технологій сприяє появі нових сплавів з покращеними властивостями.

Отже, титанові сплави завдяки унікальному поєднанню властивостей (легкість, міцність, біосумісність, корозійна стійкість) є незамінними для багатьох медичних застосувань, зокрема в ортопедії та кістковій хірургії. Розвиток комп'ютерних технологій створює можливість збору та аналізу великих об'ємів даних про склад, структуру та властивості титанових сплавів у форматі реляційної бази даних, що сприяє прискоренню розробки нових матеріалів з покращеними характеристиками. Попередня обробка даних та вибір оптимальних методів машинного навчання дають змогу отримати точне прогнозування властивостей сплавів залежно від їх складу та параметрів. Аналіз великих даних дозволяє здійснювати пошук оптимальних сплавів з бажаними параметрами для конкретних медичних застосувань, скорочуючи тривалість та вартість розробки нових матеріалів. Застосування методів машинного навчання відкриває можливість для проектування нових сплавів із заданими характеристиками без необхідності проведення великої кількості експериментів. Перспективи подальших досліджень включають розширення бази даних, розвиток методів штучного інтелекту для виявлення неочевидних закономірностей, створення експертних систем для автоматичного підбору оптимальних матеріалів та поширення підходу на інші галузі.