

0.1. Каграманян Д.Г. Генерация правдоподобных снимков микроструктур композитного сплава WC/Co при помощи нейронных сетей

Исследование статистических свойств микроструктур композитных материалов проводится путем анализа микрофотографий срезов материала. Часто анализ снимков может быть ограничен из-за малого размера выборки снимков. В работе исследуется возможность создания искусственных микроструктур с помощью генеративных нейронных сетей: диффузионная сеть [1] и GAN [2]. Мы хотим ответить на вопрос, можно ли при помощи генеративных сетей усилить статистические свойства исходных данных. Критерием правдоподобности является сравнение соответствующих распределений для реальных и искусственных микроструктур.

Мы обучили 2 сети на 500 микроснимках микроструктур WC/Co с разрешением 1536x1536 пикселей. Первая – диффузионная сеть, задача которой на базе зашумленного изображения вернуть менее зашумленное при помощи шага обратной диффузии, описанного в формуле (1).

$$p_{\theta}(x_{t-1}|x_t) = N(x_{t-1}; \mu_{\theta}(x_t, t), \Sigma_{\theta}(x_t, t)) \quad (1)$$

, где p_{θ} это диффузионная сеть, x_t это зашумленное изображение на шаге t .

Вторая сеть – генеративно состыкательная сеть GAN, состоящая из двух сетей: генератора и дискриминатора. Задача дискриминатора $D(\cdot)$ максимизировать функцию потерь (2) путем классификации настоящих и сгенерированных снимков, задача генератора $G(\cdot)$ минимизировать функцию потерь (2) путем генерации правдоподобных снимков и "обману" дискриминатора.

$$\min_G \max_D V(D, G) = E_{x \sim p_{\text{data}}(x)}[\log D(x)] + E_{z \sim p_z(z)}[\log(1 - D(G(z)))] \quad (2)$$

При помощи каждой сети мы сгенерировали по 500 снимков разного разрешения и оценили их правдоподобность при помощи метрики Вассерштейна [3] и распределения внутренних углов регионов кобальта, полученных ранее в нашей работе [4]. Анализ метрик показал, что в генеративные сети способны усиливать статистику из обучающей выборки.

Актуальность нашего решения основана на том, что в материаловедении трудно создать большой объем выборки для анализа: создание большого количества снимков требует много ресурсов. Научная новизна работы заключается в анализе применимости генеративных нейронных сетей в материаловедении, где методы машинного обучения применяются редко.

Научный руководитель – д.ф.-м.н. Щур Л.Н.

Список литературы

- [1] SOHL-DICKSTEIN J., WEISS E. A., MAHESWARANATHAN N., GANGULI S. Deep unsupervised learning using nonequilibrium thermodynamics // arXiv preprint arXiv:1503.03585v8. 2015.
- [2] HUANG Y., GOKASLAN A., KULESHOV V., TOMPKIN J. The GAN is dead; long live the GAN! A Modern GAN Baseline // arXiv preprint arXiv:2501.05441. 2025.
- [3] VILLANI C. The Wasserstein distances // Springer Berlin Heidelberg. 2009. Vol. 93.
- [4] STRAUMAL B. B., SHCHUR L. N., KAGRAMANYAN D. G., KONSTANTINOVA E. P., DRUZHININ A. V., NEKRASOV A. N. Topology of WC/Co Interfaces in Cemented Carbides // Materials. 2023. Vol. 16. N. 16. Art. 5560. DOI: 10.3390/ma16165560.