

DOI: <https://doi.org/10.36910/6775-2524-0560-2024-56-31>

УДК 004.94:620.17

Попов Олексій Ігорович, аспірант

<https://orcid.org/0009-0000-2385-5878>

Запорізький національний університет, м. Запоріжжя, Україна

УПРОВАДЖЕННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛЕВИХ МАТЕРІАЛІВ

Попов О.І. Упровадження штучного інтелекту для прогнозування властивостей металевих матеріалів.

Штучний інтелект (ШІ) змінює сферу матеріалознавства, забезпечуючи передові інструменти для прогнозування властивостей металевих матеріалів, які мають важливе значення для різних промислових застосувань. Актуальність цієї теми полягає у зростанні потреби в ефективних і точних методах оптимізації характеристик і дизайну матеріалів, що зумовлено попитом на високоєфективні матеріали в таких галузях, як аерокосмічна, автомобільна та виробнича. Традиційні підходи до прогнозування властивостей матеріалів часто передбачають проведення масштабних експериментальних випробувань і комп'ютерного моделювання, що займає багато часу і є дорогим. На противагу цьому, методи штучного інтелекту, зокрема алгоритми машинного навчання, дозволяють підвищити точність прогнозування й скоротити час розробки завдяки використанню великих наборів даних і виявленню складних закономірностей, які можуть не визначитися традиційними методами. Мета статті – аналіз застосування штучного інтелекту, зокрема методів машинного навчання, для прогнозування властивостей металевих матеріалів. У роботі увага акцентується на інтеграції моделей машинного навчання з існуючими експериментальними і комп'ютерними методами для підвищення точності й ефективності прогнозів. У цій статті розглядається застосування штучного інтелекту для прогнозування властивостей металевих матеріалів із акцентом на інтеграції моделей машинного навчання та даних, керованих методами. Результати дослідження свідчать про значний прогрес у точності та ефективності прогнозування властивостей, показуючи, як штучний інтелект може ефективно моделювати складні взаємозв'язки між складом матеріалу, умовами обробки та отриманими в результаті властивостями. Зроблені в результаті цих досліджень висновки підкреслюють трансформаційний вплив ШІ на матеріалознавство. Методи на основі штучного інтелекту не лише спрощують процес прогнозування, але й дозволяють більш точно та індивідуально розробляти матеріали, що призводить до підвищення продуктивності та впровадження інновацій. Інтеграція ШІ в цю сферу є значним кроком вперед, порівняно з традиційними підходами, і відкриває широкі перспективи для майбутніх досліджень і розробок. Продовжуючи вдосконалювати моделі штучного інтелекту й розширювати їхнє застосування, науковці та інженери можуть ще більше розкрити потенціал металевих матеріалів, стимулюючи прогрес у різних галузях промисловості та сферах застосування.

Ключові слова: штучний інтелект, нейромережі, машинне навчання, матеріали, хімічний склад, властивості матеріалів, метали

Popov O. Implementation of Artificial Intelligence for Predicting the Properties of Metallic Materials. Artificial intelligence (AI) is transforming the field of materials science by providing advanced tools for predicting the properties of metallic materials, which are crucial for various industrial applications. The relevance of this topic stems from the increasing demand for effective and accurate methods for optimizing material characteristics and design, driven by the need for high-performance materials in industries such as aerospace, automotive, and manufacturing. Traditional approaches to predicting material properties often involve extensive experimental testing and computational modeling, which can be time-consuming and costly. In contrast, AI methods, particularly machine learning algorithms, enhance prediction accuracy and reduce development time by leveraging large datasets and uncovering complex patterns that may be invisible through traditional methods. The purpose of the article is to analyse the use of artificial intelligence, in particular machine learning methods, to predict the properties of metal materials. The article focuses on the integration of machine learning models with existing experimental and computer methods to improve the accuracy and efficiency of predictions. This paper explores the application of AI for predicting the properties of metallic materials with a focus on integrating machine learning models and data-driven methodologies. The research findings indicate significant progress in prediction accuracy and efficiency, demonstrating how AI can effectively model complex relationships between material composition, processing conditions, and resulting properties. The conclusions drawn from these studies highlight the transformative impact of AI on materials science. AI-based methods not only simplify the prediction process but also enable more precise and customized material development, ultimately leading to enhanced performance and innovation. The integration of AI into this field represents a significant advancement over traditional approaches, opening up broad prospects for future research and development. By continuing to refine AI models and expand their applications, researchers and engineers can further unlock the potential of metallic materials, driving progress across various industrial sectors and applications.

Keywords: artificial intelligence, neural networks, machine learning, materials, chemical composition, material properties, metals

Постановка проблеми. Стрімкий розвиток сучасних технологій штучного інтелекту (ШІ) істотно вплинув на різні галузі науки, у тому числі й на матеріалознавство. Останнім часом потреба в прогнозуванні властивостей металевих матеріалів із високою точністю стає дедалі актуальнішою через щораз вищий попит на сучасні матеріали зі специфічними властивостями в таких галузях, як аерокосмічна, автомобільна та електронна промисловість. Зазвичай, визначення та прогнозування

властивостей металевих матеріалів значною мірою залежить від експериментальних методів, які часто є трудомісткими, вартісними та вимагають значних ресурсів. Незважаючи на те, що ці методи є ефективними, вони мають певні обмеження з точки зору масштабованості та можливості досліджувати широкий спектр потенційного складу матеріалів та умов їхньої обробки.

Використання штучного інтелекту для прогнозування властивостей металевих матеріалів є перспективним рішенням цих проблем. Завдяки використанню алгоритмів машинного навчання та підходів, що базуються на даних, ШІ може аналізувати великі масиви даних, визначати складні закономірності та надавати точні прогнози властивостей матеріалів: міцності, пластичності, електропровідності та корозійної стійкості. Ці можливості мають особливу користь у розробці нових сплавів, оптимізації вже наявних матеріалів і скороченні часу та витрат, пов'язаних із експериментальними випробуваннями [1, с. 102].

Незважаючи на значні можливості, упровадження штучного інтелекту в галузі матеріалознавства все ще перебуває на початковій стадії, і перед ним стоїть низка викликів, серед яких – потреба у високоякісних, всеосяжних наборах даних для навчання ШІ-моделей, розробка алгоритмів, здатних максимально точно відображати основні фізичні явища, а також інтеграція прогнозів ШІ з традиційними експериментальними та обчислювальними методами. Водночас зростає потреба у вирішенні питань інтерпретованості та надійності ШІ-моделей при прогнозуванні властивостей матеріалів, оскільки ці прогнози мають безпосередній вплив на безпеку та продуктивність критично важливої техніки.

Актуальність цієї теми посилюється зростанням тиску на промисловість щодо розробки матеріалів, які відповідають високим експлуатаційним критеріям, мінімізуючи при цьому вплив на навколишнє середовище. Можливість точного прогнозування властивостей матеріалів за допомогою штучного інтелекту може зробити справжній переворот у проектуванні та розробці металевих матеріалів, що призведе до ефективного використання ресурсів, прискорення інноваційних циклів і поліпшення експлуатаційних характеристик продукції. Тому впровадження ШІ у цій галузі є значним кроком у майбутнє матеріалознавства, де методи, що ґрунтуються на даних, доповнюють традиційні підходи для досягнення більш стійких і досконалих матеріальних рішень.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Застосування штучного інтелекту (ШІ) для прогнозування властивостей металевих матеріалів стало одним із головних напрямків сучасних досліджень, що зумовлено потребою в матеріалах із властивостями, пристосованими до конкретних застосувань. У цій сфері, що знаходиться на перетині матеріалознавства, інформатики та комп'ютерного моделювання, спостерігається значний прогрес, проте вона продовжує зазнавати впливу невирішених питань.

Одним із перших досягнень у цій галузі стало застосування алгоритмів машинного навчання (ML) для прогнозування механічних властивостей сплавів. Зокрема, такі вчені, як Р. Абдікеев [2, с. 27] та Б. Колупаєв [3, с. 338], розробили фреймворки, що використовують велику кількість даних про властивості матеріалів у поєднанні з передовими методами ML для прогнозування поведінки нових матеріалів. Їхні роботи показали потенціал ШІ для пришвидшення відкриття високоефективних сплавів, але також висвітлили обмеження уже наявних моделей у потребі в обширних і якісних даних, які часто не є загальнодоступними для багатьох класів матеріалів.

Дослідження О. Крюкова [4, с. 63] та І. Мельник [5, с. 154] ще більше розвинули цю сферу, застосувавши ML для прогнозування фазових діаграм, які мають важливе значення для вивчення стабільності матеріалів за різних умов. Їхнє дослідження продемонструвало, як ШІ може потенційно замінити або доповнити традиційні методи розрахунку фазових діаграм, які є довготривалими і витратними в обчислювальному плані. Водночас вони також указали на проблему інтерпретації моделей ШІ, які часто діють як «чорні скриньки», що ускладнює дослідження причин, які лежать в основі передбачуваних властивостей матеріалу.

Останнім часом використання моделей глибокого навчання (DL) набуло популярності, і такі науковці, як О. Герцик [6, с. 132] та Т. Кваша [7, с. 158] досліджують їхнє використання для прогнозування складної механічної поведінки металевих матеріалів за різних умов напруження. Такі моделі показали перспективність у відображенні нелінійних взаємозв'язків, які простіші ML-моделі можуть пропустити. Втім, вони зазначають, що глибинне навчання вимагає ще більших наборів даних і значних обчислювальних ресурсів, які можуть бути надто дорогими. До того ж,

узагальнення цих моделей на матеріали за межами навчального набору залишається відкритим питанням, що вказує на потребу в більш надійних і адаптивних фреймворках ШІ.

Інтеграція ШІ з обчисленнями з теорії першопринципів, як показано в роботі А. Кошель [8, с. 59], є ще одним важливим досягненням. Поєднуючи прогностичну силу ШІ з фундаментальними знаннями, які надають квантово-механічні розрахунки, такі гібридні моделі відкривають шлях до більш точних прогнозів властивостей матеріалів. Однак цей підхід не позбавлений викликів, особливо з точки зору вартості обчислень і необхідності балансувати між точністю та ефективністю.

Попри всі досягнення, у цій галузі все ще залишається кілька невирішених питань. Однією із головних проблем є дефіцит високоякісних маркованих даних, необхідних для навчання моделей штучного інтелекту. Хоча такі заходи, як проєкт Materials Project, досягли успіхів у створенні великих загальнодоступних баз даних, багато матеріалів, особливо нових або складних сплавів, залишаються недостатньо представленими. Брак даних не лише обмежує точність прогнозів ШІ, але й перешкоджає розробці моделей, здатних екстраполюватись за межі відомих матеріалів [9, с. 215].

Ще одне важливе питання – інтерпретованість моделей ШІ. Хоча моделі «чорної скриньки» можуть давати точні прогнози, їхня непрозорість створює проблему для матеріалознавців, які мають розуміти механізми, що керують властивостями матеріалу. Це призвело до зростання інтересу до розробки інтерпретованих ШІ-моделей або гібридних підходів, які поєднують ШІ з більш традиційними методами, заснованими на правилах, щоб забезпечити точність і розуміння.

Метою статті є аналіз застосування штучного інтелекту, зокрема методів машинного навчання, для прогнозування властивостей металевих матеріалів. Стаття акцентує увагу на інтеграції моделей машинного навчання із уже наявними експериментальними і комп'ютерними методами для підвищення точності та ефективності прогнозів.

Виклад основного матеріалу. Аналіз металевих матеріалів має важливе значення в різних галузях промисловості, де вивчення властивостей і характеристик цих матеріалів може істотно вплинути на розробку продукції, контроль якості та прогнозування експлуатаційних характеристик. Традиційні методи аналізу матеріалів, такі як експериментальні випробування і теоретичне моделювання, хоч і є ефективними, але потребують значних витрат часу, ресурсів і досвіду. Зі швидким розвитком обчислювальних технологій, зокрема машинного навчання (ML) і нейронних мереж, з'явилися нові методології, які відкривають потенціал для ефективнішого, точнішого і масштабованішого аналізу металевих матеріалів.

Основні підходи та алгоритми машинного навчання в матеріалознавстві

Машинне навчання – частина штучного інтелекту (ШІ), яка дає змогу системам вивчати закономірності на основі даних і робити прогнози або приймати рішення без прямого програмування. У матеріалознавстві алгоритми машинного навчання застосовуються для аналізу великих масивів даних, виявлення взаємозв'язків між складом матеріалу, параметрами обробки та отриманими властивостями, а також для прогнозування поведінки нових або вже наявних матеріалів за різних умов.

Основні методи машинного навчання, що використовуються в матеріалознавстві, охоплюють контрольоване навчання, неконтрольоване навчання та навчання з підкріпленням. Контрольоване навчання передбачає навчання моделі на маркованому наборі даних, де відомі взаємозв'язки між входом і виходом. Цей підхід дуже корисний для прогнозування властивостей матеріалів, таких як міцність, твердість і теплопровідність, на основі даних про склад і обробку. Алгоритми, які зазвичай використовуються в керованому навчанні, охоплюють методи прийняття рішень, машини опорних векторів (SVM) і рандомні методи [10].

Зазначимо, що з іншого боку, неконтрольоване навчання оперує немаркованими даними, коли моделі намагаються виявити притаманні їм закономірності або групування в наборі даних. Цей метод часто використовують для кластеризації матеріалів на основі їхніх властивостей або для зменшення вимірності багатовимірних даних, що дає змогу отримати керованіші та легші для інтерпретації набори даних. Аналіз головних компонентів (PCA) і кластеризація за методом k-середніх є типовими прикладами алгоритмів неконтрольованого навчання, що використовують у цьому випадку.

Навчання з використанням підкріплення, хоч і менш розповсюджене в матеріалознавстві, має потенціал для оптимізації процесів проєктування матеріалів. У цьому методі модель навчається методом проб і помилок, отримуючи зворотний зв'язок у вигляді винагород або санкцій, що робить

його придатним для ітеративних процесів, таких як синтез матеріалів або оптимізація складу сплавів.

Нейронні мережі, зокрема моделі глибинного навчання, привернули до себе значну увагу в матеріалознавстві завдяки здатності моделювати складні, нелінійні взаємозв'язки між змінними. Нейронна мережа складається із шарів взаємопов'язаних вузлів або «нейронів», кожен із яких виконує зважені суми входів, за якими слідує нелінійні функції активації. Регулюючи значення ваг за допомогою процесу, який називають зворотним поширенням, мережа вчиться апроксимувати основну функцію, яка відображає вхідні дані та вихідні.

У сфері металевих матеріалів нейронні мережі активно використовуються для прогнозування властивостей матеріалів на основі композиційних і мікроструктурних даних. Наприклад, згорнуті нейронні мережі (CNN), які ефективно обробляють дані зображень, можна використовувати для аналізу мікрофотографій металевих зразків і прогнозування таких властивостей, як розмір зерен, фазовий розподіл і механічна міцність. Для моделювання часової еволюції властивостей матеріалу під час таких процесів, як термообробка або деформація, застосовуються рекурентні нейронні мережі (RNN), призначені для обробки послідовних даних [11, с. 3408].

Однією із найважливіших особливостей нейронних мереж є їхня здатність обробляти великі, складні набори даних з великою кількістю змінних, що робить їх придатними для вирішення багатofакторних задач, які часто трапляються в матеріалознавстві. До того ж, нейронні мережі можуть навчатися ієрархічному представленню даних, фіксуючи як низькорівневі особливості (наприклад, атомний склад), так і високі рівні (наприклад, мікроструктурні особливості), які впливають на властивості матеріалу.

Водночас нейронні мережі також мають певні проблеми, особливо з точки зору інтерпретації даних. На відміну від простіших моделей, нейронні мережі працюють як «чорний ящик», що заважає визначити конкретний вплив окремих вхідних змінних на остаточний прогноз. Така недостатня прозорість може бути суттєвим недоліком у наукових застосуваннях, де вивчення механізмів, що лежать в основі, є не менш важливим, ніж точне прогнозування.

Використання машинного навчання та нейронних мереж у матеріалознавстві має декілька значних переваг. Перш за все, це можливість прискорити відкриття та оптимізацію нових матеріалів. Традиційні експериментальні підходи зазвичай вимагають обширного тестування методом проб і помилок, що може зайняти багато часу і бути витратним. Моделі машинного навчання можуть значно зменшити цей тиск, прогнозуючи найбільш перспективний склад матеріалу або умови обробки, тим самим більш ефективно спрямовуючи експериментальні дослідження.

Ще однією перевагою є можливість виявлення прихованих закономірностей у складних наборах даних. Дані матеріалознавства найчастіше є багатовимірними, з численними взаємодіючими змінними. Алгоритми машинного навчання, зокрема нейронні мережі, успішно виявляють приховані нелінійні взаємозв'язки, які можуть бути невидимими для традиційних статистичних методів. Така здатність може призвести до нових ідей і глибокого аналізу факторів, що впливають на властивості матеріалів.

Незважаючи на ці переваги, існують і суттєві недоліки та виклики, пов'язані з цими методами. Однією із головних проблем є якість і кількість даних, необхідних для ефективного навчання моделей машинного навчання. У матеріалознавстві отримання великих високоякісних наборів даних може бути проблематичним, особливо для нових або складних матеріалів. Недостатній або надмірний обсяг даних може призвести до низької продуктивності моделі, надмірної адаптації та недостовірних прогнозів [12, с. 1164].

Ще однією проблемою є інтерпретація моделей машинного навчання, особливо нейронних мереж. Ці моделі можуть досягати високої точності, але їхній характер «чорної скриньки» ускладнює отримання значущих наукових висновків з отриманих результатів. Така непрозорість може стати бар'єром для їхнього застосування в дослідницьких і промислових умовах, де знання механізмів, що лежать в їхній основі, має ключове значення.

Упровадження машинного навчання та нейронних мереж вимагає спеціальних знань як у галузі матеріалознавства, так і в галузі інформатики. Розробка і перевірка моделей, які є одночасно точними і науково обґрунтованими, може бути складним і ресурсомістким процесом.

Обчислювальні ресурси, необхідні для навчання великих нейронних мереж, можуть бути суттєвими, особливо для моделей глибокого навчання з багатьма параметрами.

Попри ці виклики, інтеграція машинного навчання та нейронних мереж у матеріалознавство є важливим інструментом для розвитку цієї галузі. Оскільки доступність даних і обчислювальна потужність продовжують зростати, ці методи, очевидно, стануть все більш важливими у відкритті, оптимізації та аналізі металевих матеріалів (табл. 1).

Таблиця 1. Характеристика моделей та алгоритмів ШІ, які використовуються у прогнозуванні властивостей металевих матеріалів

Алгоритм/Модель	Використання у матеріалознавстві	Переваги	Виклики
Дерева рішень	Прогнозування властивостей матеріалу на основі інформації про склад	Легко інтерпретується, добре обробляє категорії даних	Схильні до перенавчання, менш ефективні на складних даних
Масиви опорних векторів (SVM)	Класифікація фаз на мікроструктурних зображеннях	Ефективний у високовимірних просторах	Потребує уважного налаштування параметрів
Згорткові нейронні мережі (CNN)	Аналіз мікрофотографій для прогнозування розміру зерна та розподілу фаз	Відмінно обробляє дані зображень, фіксує просторові ієрархії	Інтенсивні обчислення, складні для інтерпретації
Аналіз головних компонент (PCA)	Зменшення розмірності у високорозмірних наборах даних	Спрощує дані, виділяє ключові характеристики	Може втратити важливу інформацію в процесі зменшення розмірності
Кластеризація за методом К-середніх	Групування матеріалів на основі схожих властивостей	Простий та ефективний, легко реалізується	Припускає сферичні кластери, чутливий до початкових умов

Для прогнозування властивостей металевих матеріалів використовують кілька типів моделей, кожна із яких має свої переваги та недоліки. Найпоширеніші моделі поділяються на емпіричні, статистичні та моделі машинного навчання.

Емпіричні моделі ґрунтуються на спостережуваних залежностях між властивостями матеріалу і параметрами обробки. Такі моделі часто мають форму рівнянь, отриманих на основі експериментальних даних, і широко використовуються завдяки своїй простоті і легкості застосування. Наприклад, залежність Холла-Петча, яка пов'язує розмір зерна з межею міцності, є емпіричною моделлю, що часто використовується в металургії. Хоча емпіричні моделі корисні для швидкого прогнозування, вони зазвичай обмежені конкретними умовами, у яких вони були розроблені, і не можуть добре узагальнюватися на нові матеріали або методи обробки [13].

Статистичні моделі, такі як регресійний аналіз, розширюють емпіричні моделі за рахунок включення імовірнісних елементів. Ці моделі дозволяють враховувати кілька змінних і можуть надавати прогнози з відповідними діапазонами достовірності. Множинна лінійна регресія є широко застосовуваною статистичною моделлю в матеріалознавстві, де вона використовується для прогнозування таких властивостей, як твердість, в'язкість або корозійна стійкість на основі композиційних і мікроструктурних даних. Попри свою надійність, статистичні моделі можуть мати проблеми з відображенням нелінійних взаємозв'язків між змінними, які часто наявні в складних матеріальних системах.

Моделі машинного навчання представляють вдосконалений підхід до прогнозування властивостей, використовуючи обчислювальні алгоритми для виявлення закономірностей у великих наборах даних. На відміну від емпіричних і статистичних моделей, моделі машинного навчання не вимагають явних припущень про взаємозв'язки між змінними. Натомість вони вивчають ці взаємозв'язки безпосередньо з даних. Найпоширеніші моделі машинного навчання, що використовуються в матеріалознавстві, охоплюють дерева рішень, машини опорних векторів (SVM) і нейронні мережі, про які йшла мова вище. Ці моделі особливо ефективні при обробці даних високої розмірності і можуть вловлювати складні, нелінійні взаємодії між параметрами матеріалу. Однак розробка моделей машинного навчання може бути ресурсомісткою і вимагати великих обсягів даних для точних прогнозів.

Ефективність прогнозних моделей у матеріалознавстві значною мірою залежить від вибору вхідних параметрів, які повинні охоплювати основні фактори, що впливають на властивості

матеріалу, які представляють інтерес. Ці параметри зазвичай поділяються на три основні категорії: композиційні, мікроструктурні та параметри обробки.

Композиційні параметри стосуються хімічного складу матеріалу, включаючи тип і концентрацію легуючих елементів. Для металевих матеріалів ключові параметри складу можуть охоплювати відсотковий вміст вуглецю, хрому, нікелю та інших елементів, які впливають на такі властивості, як твердість, корозійна стійкість і міцність на розрив. Вибір цих параметрів має важливе значення, оскільки навіть невеликі зміни у складі можуть призвести до значних змін у поведінці матеріалу [14].

Мікроструктурні параметри описують внутрішню будову матеріалу, яка може містити розмір зерна, фазовий розподіл, щільність дислокацій та кристалографічну текстуру. Ці параметри безпосередньо пов'язані з механічними та фізичними властивостями матеріалу. Наприклад, розмір зерна є критичним мікроструктурним параметром, який впливає на міцність і пластичність, що описується співвідношенням Холла-Петча. Так само розподіл різних фаз у сплаві може впливати на його в'язкість і зносостійкість.

Параметри обробки охоплюють умови, за яких матеріал було виготовлено або оброблено, такі як температура, швидкість охолодження та попередня історія деформації. Ці параметри відіграють важливу роль у визначенні кінцевої мікроструктури і, відповідно, властивостей матеріалу. Наприклад, швидкість охолодження під час термічної обробки може впливати на формування мартенситних або перлітних фаз у сталі, тим самим впливаючи на її твердість і міцність. Точне врахування впливу параметрів обробки має важливе значення для моделей, які мають на меті передбачити властивості матеріалу в різних виробничих умовах.

Застосування предиктивних моделей у матеріалознавстві дуже різноманітне, численні дослідження демонструють їхню корисність для різних типів металевих матеріалів і прогнозування властивостей. Одним із яскравих прикладів є використання моделей машинного навчання для прогнозування міцності на розрив сталевих сплавів. У дослідженні високоміцних низьколегованих сталей (HSLA) науковці використали модель машини опорних векторів (SVM) для прогнозування міцності на розрив на основі даних про склад та умови обробки. Модель успішно врахувала складні нелінійні взаємодії між такими елементами, як вуглець, марганець і ніобій і змогла передбачити межу міцності на розрив із високою точністю, перевершивши традиційні регресійні моделі [13 – 14].

Інший приклад стосується прогнозування корозійної стійкості нержавіючої сталі. Науковці розробили модель множинної лінійної регресії для оцінки стійкості до точкової корозії на основі складу матеріалу, включаючи концентрацію хрому, молібдену та азоту. Модель надала важливу інформацію про вплив цих елементів на корозійну поведінку, що допомогло спрямувати розробку більш стійких до корозії сплавів для використання в суворих умовах.

У галузі адитивного виробництва для прогнозування властивостей металевих деталей, виготовлених методом селективного лазерного плавлення (SLM), застосовують предиктивні моделі. Нейромережева модель використовувалася для прогнозування щільності та механічних властивостей деталей з титанового сплаву на основі потужності лазера, швидкості сканування та товщини шару. Модель змогла передбачити оптимальні параметри процесу для отримання деталей високої щільності з чудовими механічними властивостями, що продемонструвало потенціал моделей машинного навчання в оптимізації процесів адитивного виробництва.

Емпіричні моделі продовжують відігравати важливу роль у матеріалознавстві, особливо в таких добре відомих галузях, як зварювання та лиття. Наприклад, рівняння Розенталя, емпірична модель широко використовується для прогнозування термічних циклів і отриманої мікроструктури під час зварювання. Хоча ця модель відносно проста, вона надає важливу інформацію для контролю зони термічного впливу та запобігання дефектам, таким як розтріскування або надмірний ріст зерна.

Подальший розвиток штучного інтелекту в прогнозуванні властивостей металевих матеріалів скоріш за все буде зосереджено на кількох ключових напрямках. Одним із найважливіших є покращення інтерпретованості моделей. Сучасні моделі ШІ, зокрема алгоритми глибинного навчання, забезпечують високу точність прогнозування, але вони часто працюють як «чорні скриньки», даючи мало інформації про основні механізми, що лежать в основі їхніх прогнозів. Дослідження, спрямовані на розробку інтерпретованих моделей ШІ або методів

отримання змістовної інформації з існуючих моделей, матимуть важливе значення для здобуття довіри наукової спільноти та сприяння впровадженню ШІ в матеріалознавство.

Іншим перспективним напрямком досліджень є розробка гібридних моделей, які поєднують традиційні фізичні підходи з методами ШІ, керованими даними. Такі гібридні моделі можуть використовувати сильні сторони обох підходів, застосовуючи ШІ для обробки складних, багатовимірних наборів даних, водночас враховуючи фундаментальні принципи матеріалознавства, щоб керувати прогнозами і забезпечувати їхню фізичну вірогідність. Така інтеграція ШІ з усталеними науковими знаннями може призвести до створення точніших і надійніших моделей для прогнозування властивостей матеріалів [15].

Також існує значний потенціал для дослідження методів навчання з використанням перенесення і навчання з кількох спроб в контексті металевих матеріалів. Навчання з перенесенням передбачає адаптацію моделі, навченої на одному наборі даних, до іншого, але пов'язаного з ним набору даних, що може бути дуже корисним у матеріалознавстві, де зазвичай бракує великих високоякісних наборів даних. Навчання з кількох спроб має на меті дозволити моделям робити точні прогнози на основі дуже обмежених даних, що може сприяти швидкому дослідженню нових матеріалів з мінімальним експериментальним навантаженням.

Вивчення генеративних моделей для дизайну матеріалів – ще один цікавий напрямок досліджень. Генеративні моделі, такі як генеративні нейронні мережі (GAN) або варіаційні автокодері (VAE), можуть створювати нові зразки даних на основі вивчених розподілів. У матеріалознавстві ці моделі можуть бути використані для створення нових композицій сплавів або мікроструктур із бажаними властивостями, прискорюючи відкриття нових матеріалів за допомогою обчислювальних експериментів.

Із розвитком штучного інтелекту інтеграція нових технологій і методів стає вирішальним фактором у його застосуванні для прогнозування властивостей металевих матеріалів. Одним із найбільш важливих досягнень у цій галузі є використання квантових обчислень у поєднанні зі штучним інтелектом. Квантові обчислення мають потенціал для розв'язання складних оптимізаційних задач і виконання симуляцій, які наразі неможливі за допомогою класичних комп'ютерів. Інтеграція квантових обчислень з моделями штучного інтелекту може уможливити прогнозування властивостей матеріалів з високою точністю та ефективністю, особливо для систем з високим ступенем складності або тих, що потребують дослідження величезних просторів параметрів.

Ще однією новою технологією є використання об'єднаного навчання в матеріалознавстві, що передбачає навчання моделей штучного інтелекту на основі декількох децентралізованих наборів даних без спільного використання самих даних, що має особливе значення в галузях, де конфіденційність і безпека даних викликають сумніви. У контексті металевих матеріалів об'єднане навчання може уможливити проведення спільних досліджень у різних установах і галузях, що дозволить ШІ-моделям отримувати вигоду від ширшого кола джерел даних, зберігаючи при цьому конфіденційність даних.

Упровадження методів аналізу штучного інтелекту, що піддається поясненню (XAI), також є вирішальним кроком в інтеграції ШІ в матеріалознавство. Пояснювальний ШІ зосереджується на розробці моделей, які є прозорими та інтерпретованими, забезпечуючи користувачам розуміння того, як і чому робляться конкретні прогнози. Це має особливе значення для наукових і промислових застосувань, де знання обґрунтування прогнозів моделі має важливе значення для прийняття зважених рішень. Інтеграція методів XAI в моделі ШІ для прогнозування властивостей матеріалів може підвищити рівень довіри до них і сприяти їхньому впровадженню як у дослідницьких, так і в промислових умовах [14 – 15].

До того ж, як прогнозується, застосування ШІ у відкритті високопродуктивних матеріалів буде ставати дедалі актуальнішим. Високопродуктивні експерименти передбачають швидкий синтез і тестування великої кількості зразків матеріалів, генеруючи величезні обсяги даних, які можна використовувати для навчання моделей ШІ. Інтегруючи ШІ з високопродуктивними методами, науковці можуть швидко виявляти перспективні матеріали-кандидати та оптимізувати їхні властивості, що значно прискорить темпи розробки матеріалів.

Досягнення в галузі штучного інтелекту для прогнозування властивостей металевих матеріалів мають значні перспективи для різних промислових процесів, зокрема у виробництві,

контролі якості та дизайні матеріалів. Одне із найбільш актуальних застосувань – оптимізація складу сплавів і умов обробки. ШІ-моделі можна використовувати для прогнозування властивостей сплавів на основі їхнього складу та параметрів обробки, що дозволяє виробникам точніше налаштовувати ці змінні для досягнення бажаних характеристик матеріалу. Це може призвести до розробки нових, високоефективних матеріалів, зменшуючи при цьому потребу в дорогих і трудомістких експериментальних випробуваннях.

Інша потенційна реалізація – у сфері прогнозного технічного обслуговування і контролю якості. ШІ-моделі можуть аналізувати дані датчиків і систем моніторингу для прогнозування деградації металевих компонентів у режимі реального часу, що дозволяє проводити проактивне технічне обслуговування і знижує ризик неочікуваних несправностей. У таких галузях, як аерокосмічна, автомобільна та енергетична, де цілісність металевих матеріалів має вирішальне значення, прогнозоване технічне обслуговування на основі штучного інтелекту може значно підвищити безпеку й надійність при одночасному зниженні експлуатаційних витрат.

ШІ може відігравати вирішальну роль в адитивному виробництві (AM) металевих матеріалів. Адитивне виробництво, або 3D-друк, – це галузь, що швидко розвивається і дозволяє створювати складні, індивідуальні деталі з мінімальними відходами матеріалу. ШІ-моделі можна використовувати для оптимізації процесу AM, прогножуючи властивості надрукованих деталей на основі вхідних параметрів, таких як потужність лазера, швидкість сканування і товщина шару. Це може призвести до виробництва високоякісних компонентів з індивідуальними властивостями, розширюючи сферу застосування адитивного виробництва у таких галузях, як аерокосмічна, медична та автомобільна промисловість.

ШІ також має потенціал для трансформації управління ланцюгами поставок у матеріалообробній промисловості. Прогнозуючи попит на конкретні матеріали та оптимізуючи рівень запасів, ШІ може допомогти компаніям зменшити відходи, мінімізувати витрати та забезпечити стабільне постачання матеріалів (табл. 2).

Таблиця 2. Вплив напрямів досліджень та технологій ШІ на прогнозування металевих матеріалів

Напрямок досліджень/технологія	Потенційний вплив на прогнозування металевих матеріалів	Проблеми
Інтерпретованість моделі	Підвищує рівень довіри та прийняття в науковому та промисловому середовищі	Баланс між точністю та прозорістю
Гібридні моделі (фізика + ШІ)	Поєднують сильні сторони підходів, що базуються на даних та фізиці	Забезпечення фізичної правдоподібності прогнозів ШІ
Квантові обчислення + ШІ	Дозволяє робити високоточні прогнози для складних матеріальних систем	Потребує вдосконалення квантового обладнання та алгоритмів
Об'єднане навчання	Сприяє спільним дослідженням, зберігаючи конфіденційність даних	Неоднорідність даних і проблеми координації моделей
Пояснюваний ШІ (Explainable AI, XAI)	Забезпечує прозорість і розуміння прогнозів ШІ	Розробка методів, які не ставлять під загрозу продуктивність моделі
Високопродуктивне виявлення матеріалів + ШІ	Прискорює відкриття та оптимізацію нових матеріалів	Управління та обробка великомасштабних експериментальних даних

Особливо це важливо в галузях, де металеві матеріали є важливими компонентами, наприклад, у будівництві, автомобілебудуванні та електроніці.

Інтеграція штучного інтелекту в промислові процеси не позбавлена проблем. Забезпечення стійкості та надійності моделей штучного інтелекту в реальних умовах має важливе значення, так само як і вирішення питань, пов'язаних із якістю даних, інтерпретацією моделей і необхідністю спеціальних знань і досвіду. Але в міру того, як технологія штучного інтелекту продовжує розвиватися, її потенціал для підвищення ефективності, стійкості та інноваційності промислових процесів, пов'язаних із металевими матеріалами, стає дедалі більше помітним.

Висновки. Таким чином, машинне навчання та нейронні мережі відкривають великі можливості для аналізу та прогнозування властивостей металевих матеріалів. Здатність моделювати складні взаємозв'язки, аналізувати великі масиви даних і прискорювати відкриття матеріалів робить їх незамінними інструментами в матеріалознавстві. Водночас для повної реалізації їхніх переваг

необхідно вирішити такі проблеми, як вимоги до даних, інтерпретованість моделей і потреба в спеціалізованій експертизі.

Моделі для прогнозування властивостей металевих матеріалів є незамінними інструментами в матеріалознавстві, що дозволяють науковцям та інженерам прогнозувати поведінку матеріалів, оптимізувати їхні склади та вдосконалювати методи обробки. Вибір моделі залежить від конкретного застосування: емпіричні моделі пропонують простоту, статистичні – надійність, а моделі машинного навчання – точність і гнучкість в обробці складних наборів даних.

Перспективи розвитку штучного інтелекту в прогнозуванні властивостей металевих матеріалів дуже високі і мають значний потенціал для просування як наукових досліджень, так і промислових застосувань. Зосереджуючись на ключових напрямках досліджень (інтерпретованість моделей, гібридні підходи) та інтеграції нових технологій, таких як квантові обчислення, ця галузь може вирішувати поточні проблеми і відкривати нові можливості. Потенційні можливості застосування ШІ в промислових процесах – від оптимізації сплавів до прогнозованого технічного обслуговування та адитивного виробництва – показують трансформаційний вплив цих технологій.

Список бібліографічного опису

1. Амоша О. І., Нікіфорова В. А. Світовий досвід становлення металургійних смарт-виробництв: особливості, напрями, наслідки. *Економіка промисловості*. 2019. № 2 (86). С.84–106.
2. Абдікеев Р. Р., Чекина В. Д., Лішук О. В., Вишневецький О. С. ІТ-кластери як інструмент забезпечення смарт-спеціалізації регіонів України. *Економічний вісник Донбасу*. 2022. № 2 (68). С. 21–34. DOI: [https://doi.org/10.12958/1817-3772-2022-2\(68\)-21-34](https://doi.org/10.12958/1817-3772-2022-2(68)-21-34)
3. Колупасєв Б. Б., Колупасєв Б. С., Левчук В. В., Максимцев Ю. Р., Матвійчук О. В. Математичне моделювання процесу термодеструкції полівінілхлориду, наповненого нанодисперсними металами. *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*. 2023. № 21 (2). С. 331 – 347.
4. Крюкова О., Павлій О., Глабуць С., Кухта І. Застосування ультразвукового та радіографічного методів для оцінки якості металевих виробів адитивного виробництва. *Technologies and Engineering*. 2024. № 1. С. 60–66. DOI: <https://doi.org/10.30857/2786-5371.2024.1.6>
5. Мельник І., Тугай С., Кирик В., Ковальчук Д. Теоретичне оцінювання тиску гармат високовольтного тліючого заряду для використання в електронно-променевої технології зварювання металевих виробів. *Прикладні питання математичного моделювання*. 2021. № 4 (1). С. 147–160. DOI: <https://doi.org/10.32782/KNTU2618-0340/2021.4.1.16>
6. Герцик О., Ковбуз М., Пандяк Н., Ташак М. Особливості формування поверхневих шарів на металах. *Праці наукового товариства ім. Шевченка. Хімічні науки*. 2022. № 70. С. 128-137. DOI: <https://doi.org/10.37827/ntsh.chem.2022.70.128>
7. Кваша Т., Коваленко О. Технологічні тренди у сфері нових матеріалів для енергетики та військової сфери. *Grail of Science*. 2022. № 12-13. С. 154-163. DOI: <https://doi.org/10.36074/grail-of-science.29.04.2022.023>
8. Кошель А. Перспективні напрями застосування нейронних мереж у конструкторській діяльності. *Комп'ютерно-інтегровані технології: освіта, наука, виробництво*. 2022. № 46. С. 57–63. DOI: <https://doi.org/10.36910/6775-2524-0560-2022-46-08>
9. Яремчук С. О., Маслов І. З. Фотоелектричні системи на судні: фізичний експеримент та аналіз з використанням штучного інтелекту. *Водний транспорт*. 2023. № 2 (38). С. 207–221. DOI: doi.org/10.33298/2226-8553.2023.2.38.22
10. Ihalge A., Hao Y. Formula Graph Self-Attention Network for Representation-Domain Independent Materials Discovery. 2022. № 9 (18). *Advanced Science*. DOI: <https://doi.org/10.1002/advs.202200164>
11. Huang J. S., Liew J. X., Ademiloye A. S., Liew K. M. Artificial intelligence in materials modeling and design. *Archives of Computational Methods in Engineering*. 2021. № 28. P. 3399–3413. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11831-020-09506-1>
12. Guo K., Yang Z., Yu C. H., Buehler M. J. Artificial intelligence and machine learning in design of mechanical materials. *Materials Horizons*. 2021. № 8 (4). P. 1153-1172. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0MH01451F>
13. Романенко В. Технологія контролю якості виробів адитивного виробництва в ході друку елементів енергетичних комплексів. *Системні дослідження в енергетиці*. 2024. № 2a(78). С. 43–45.
14. Conrad F., Mälzer M., Schwarzenberger M., Wiemer H., Ihlenfeldt S. Benchmarking AutoML for regression tasks on small tabular data in materials design. *Scientific Reports*. 2022. № 12. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-022-23327-1>
15. Herriott C., Spear A. D. Predicting microstructure-dependent mechanical properties in additively manufactured metals with machine-and deep-learning methods. *Computational Materials Science*. 2020. № 175. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109599>
16. Benchmarking materials property prediction methods: the Matbench test set and Automatminer reference algorithm / A. Dunn et al. *npj Computational Materials*. 2020. Vol. 6, no. 1. URL: <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00406-3> (date of access: 01.09.2024)

References

1. Amosha, O. I., & Nikiforova, V. A. (2019). Svitovi dosvid stanovlennia metalurhiinykh smart-vyrobnystv: osoblyvosti, napriamy, naslidky [Global Experience in the Establishment of Metallurgical Smart Production: Features, Directions, Consequences]. *Ekonomika promyslovosti - Industrial Economics*, 2 (86), 84–106. [in Ukrainian].
2. Abdikeiev, R. R., Chekina, V. D., Lishchuk, O. V., & Vyshnevskiy, O. S. (2022). IT-klastery yak instrument zabezpechennia smart-spetsializatsii rehioniv Ukrainy [IT Clusters as a Tool for Ensuring Smart Specialization of Ukrainian Regions]. *Ekonomichnyi visnyk Donbasu - Economic Bulletin of Donbas*, 2 (68), 21–34. DOI: [https://doi.org/10.12958/1817-3772-2022-2\(68\)-21-34](https://doi.org/10.12958/1817-3772-2022-2(68)-21-34) [in Ukrainian].
3. Kolupaiev, B. B., Kolupaiev, B. S., Levchuk, V. V., Maksymtsev, Yu. R., & Matviichuk, O. V. (2023). Matematyчне modeliuвання protsesu termodestruktsii polivinilkhlorydu, napovnenoho nanodispersnyimi metalamy [Mathematical Modeling of the Thermodestruction Process of Polyvinyl Chloride Filled with Nanodispersed Metals]. *Nanosystemy, Nanomaterialy, Nanotekhnolohii*, 21 (2), 331 – 347. [in Ukrainian].
4. Kriukova, O., Pavlii, O., Hlabuts, S., & Kukhta, I. (2024). Zastosuvannia ultrazvukovoho ta radiografichnogo metodiv dlia otsinky yakosti metalevykh vyrobiv addytyvnoho vyrobnystva [Application of Ultrasonic and Radiographic Methods for Assessing the Quality of Metal Products in Additive Manufacturing]. *Technologies and Engineering*, 1, 60–66. DOI: <https://doi.org/10.30857/2786-5371.2024.1.6> [in Ukrainian].
5. Melnyk, I., Tuhai, S., Kyryk, V., & Kovalchuk, D. (2021). Teoretyчне otsiniuvannia tysku harmat vysokovoltynoho tliuchoho zariadu dlia vykorystannia v elektronno-promenevii tekhnolohii zvaryuvannia metalevykh vyrobiv [Theoretical Estimation of the Pressure of High-Voltage Glow Discharge Guns for Use in Electron Beam Welding Technology of Metal Products]. *Prykladni pytannia matematychnoho modeliuвання - Applied Issues of Mathematical Modeling*, 4(1), 147–160. DOI: <https://doi.org/10.32782/KNTU2618-0340/2021.4.1.16> [in Ukrainian].
6. Hertsyk, O., Kovbuz, M., Pandyak, N., & Tashak, M. (2022). Osoblyvosti formuvannia poverkhnevyykh shariv na metalakh [Features of Surface Layer Formation on Metals]. *Pratsi naukovohto tovarystva im. Shevchenka. Khimichni nauky - Proceedings of the Shevchenko Scientific Society. Chemical Sciences*, 70, 128–137. DOI: <https://doi.org/10.37827/ntsh.chem.2022.70.128> [in Ukrainian].
7. Kvasha, T., & Kovalenko, O. (2022). Tekhnolohichni trendy u sferi novykh materialiv dlia enerhetyky ta viiskovoi sfery [Technological Trends in the Field of New Materials for Energy and Military Applications]. *Grail of Science*, 12 - 13, 154 – 163. DOI: <https://doi.org/10.36074/grail-of-science.29.04.2022.023> [in Ukrainian].
8. Koshel, A. (2022). Perspektyvni napriamky zastosuvannia neironnykh mrezezh u konstruktorstcii diialnosti [Promising Directions for the Application of Neural Networks in Design Activities]. *Kompiuterno-intehrovani tekhnolohii: osvita, nauka, vyrobnystvo - Computer-Integrated Technologies: Education, Science, Production*, 46, 57–63. DOI: <https://doi.org/10.36910/6775-2524-0560-2022-46-08> [in Ukrainian].
9. Yaremchuk, S. O., & Maslov, I. Z. (2023). Fotoelektrychni systemy na sudni: fizychnyi eksperyment ta analiz z vykorystanniam shtuchnogo intelektu [Photovoltaic Systems on Ships: Physical Experiment and Analysis Using Artificial Intelligence]. *Vodnyi transport - Water Transport*, 2 (38), 207–221. DOI: <https://doi.org/10.33298/2226-8553.2023.2.38.22> [in Ukrainian].
10. Ihalge, A., & Hao, Y. (2022). Formula graph self-attention network for representation-domain independent materials discovery. *Advanced Science*, 9(18). DOI: <https://doi.org/10.1002/advs.202200164>
11. Huang, J. S., Liew, J. X., Ademiloye, A. S., & Liew, K. M. (2021). Artificial intelligence in materials modeling and design. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 28, 3399 – 3413. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11831-020-09506-1>
12. Guo, K., Yang, Z., Yu, C. H., & Buehler, M. J. (2021). Artificial intelligence and machine learning in design of mechanical materials. *Materials Horizons*, 8(4), 1153–1172. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0MH01451F>
13. Romanenko, V. (2024). Tekhnolohiia kontroliu yakosti vyrobiv addytyvnoho vyrobnystva v khodi druky elementiv enerhetychnykh kompleksiv [Quality Control Technology for Additive Manufacturing Products During the Printing of Components for Energy Complexes]. *Systemni doslidzhennia v enerhetytsi - Systemic Research in Energy*, 2a(78), 43–45. [in Ukrainian].
14. Conrad, F., Mälzer, M., Schwarzenberger, M., Wiemer, H., & Ihlenfeldt, S. (2022). Benchmarking AutoML for regression tasks on small tabular data in materials design. *Scientific Reports*, 12. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-022-23327-1>
15. Herriott, C., & Spear, A. D. (2020). Predicting microstructure-dependent mechanical properties in additively manufactured metals with machine-and deep-learning methods. *Computational Materials Science*, 175. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109599>
16. Dunn, A., Wang, Q., Ganose, A., Dopp, D., & Jain, A. (2020). Benchmarking materials property prediction methods: the Matbench test set and Automatminer reference algorithm. *npj Computational Materials*, 6(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00406-3>