

УДК 004.896+620.22+ 669.017

DOI <https://doi.org/10.32782/3041-2080/2025-5-17>

ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ У МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ: ЗМІНИ У ВІДКРИТТІ ТА РОЗРОБЦІ МАТЕРІАЛІВ

Пашинська Олена Генріхівна,

доктор технічних наук,

старший науковий співробітник,

професор кафедри природничо-наукових та загально-інженерних дисциплін

ТОВ «ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «МЕТІНВЕСТ ПОЛІТЕХНІКА»,

провідний науковий співробітник

відділу високих тисків та перспективних технологій

Донецького фізико-технічного інституту імені О. О. Галкіна

Національної академії наук України

ORCID ID: 0000-0001-7102-1544

Завдовєєв Анатолій Вікторович,

кандидат технічних наук,

провідний науковий співробітник відділу зварювання легованих сталей

Інституту електрозварювання імені Є. О. Патона

Національної академії наук України

ORCID ID: 0000-0003-2811-0765

У огляді висвітлено трансформаційний вплив штучного інтелекту в різних галузях матеріалознавства. Показано, що у сучасному матеріалознавстві спостерігається інтенсивна інтеграція зі штучним інтелектом (ШІ), що кардинально змінює парадигми наукових досліджень та технологічних розробок. Ця синергія відкриває нові горизонти для прогнозування властивостей матеріалів, оптимізації складу та структури. Використання методів машинного навчання (МН), зокрема глибокого навчання (ГН), пришвидшує процеси відкриття нових функціональних матеріалів за рахунок того, що дає змогу аналізувати величезні масиви експериментальних даних та результатів комп'ютерного моделювання, ідентифікувати приховані закономірності та встановлювати кореляції між складом, структурою та макроскопічними властивостями. Застосування ШІ в матеріалознавстві включає низку ключових напрямів. Алгоритми МН успішно використовуються для прогнозування термодинамічної стабільності та механічних характеристик сплавів, а також для моделювання процесів синтезу та обробки матеріалів. Моделі ГН демонструють високу ефективність у розпізнаванні мікроструктур за зображеннями, отриманими за допомогою електронної мікроскопії, що сприяє автоматизації аналізу та контролю якості. Крім того, методи ШІ є незамінними для виявлення оптимальних умов кристалізації, що забезпечує спрямований дизайн матеріалів із заданими властивостями. Таким чином, ШІ виступає не просто як інструмент, а як каталізатор прогресу, що дає змогу перейти від емпіричних методів «спроб і помилок» до раціонального, цілеспрямованого проєктування матеріалів. Ця тенденція є вирішальною для майбутнього розвитку матеріалознавства, оскільки вона значно скорочує час і ресурси, необхідні для комерціалізації інноваційних технологій.

Ключові слова: штучний інтелект, матеріалознавство, нова концепція дизайну матеріалів, обробка зображень, склад, структура, алгоритми комп'ютерного зору.

Pashynska Olena, Zavdovieiev Anatolii. Artificial intelligence in materials science: changes in materials discovery and development

This review highlighted the transformative impact of artificial intelligence in various fields of materials science. It is shown that modern materials science is undergoing intense integration with artificial intelligence (AI), which fundamentally changes the paradigms of scientific research and technological development. This synergy opens up new horizons for predicting material properties, and optimizing their composition and structure. The use of machine learning (ML) methods, particularly deep learning (DL), accelerates the processes of discovering new functional materials by allowing the analysis of vast arrays of experimental data and computational modeling results, identifying hidden patterns, and establishing correlations between composition, structure, and macroscopic properties. The application of AI in materials science includes several key areas. ML algorithms are successfully used for predicting the thermodynamic stability and mechanical properties of alloys, as well as for modeling material synthesis and processing. DL models show high efficiency in recognizing microstructures from images obtained with electron microscopy, which contributes to the automation of analysis and quality control. Furthermore, AI methods are indispensable for identifying optimal crystallization conditions, ensuring the directed design of materials with desired properties. Thus, AI acts not just as

a tool, but as a catalyst for progress, allowing a transition from empirical «trial and error» methods to rational, goal-oriented material design. This trend is crucial for the future development of materials science, as it significantly reduces the time and resources required for the commercialization of innovative technologies.

Key words: artificial intelligence (AI), materials science, new concept of materials design, image processing, composition, structure, computer vision algorithms.

Вступ. Штучний інтелект (ШІ) стрімко трансформує різноманітні наукові та інженерні галузі, і матеріалознавство не є винятком [1; 2; 3; 4]. Завдяки здатності обробляти величезні обсяги даних, виявляти складні закономірності та прогнозувати властивості ШІ відкриває нові горизонти у відкритті, розробці та оптимізації матеріалів. Традиційні підходи до розроблення матеріалів часто є тривалими, дороговартісними та ґрунтуються на емпіричних спробах і помилках. ШІ пропонує ефективну альтернативу, забезпечуючи низку значних переваг. Розглянемо, чи може ШІ допомогти прискореному відкриттю нових матеріалів.

Алгоритми машинного навчання (МН) здатні швидко аналізувати наявні бази даних матеріалів, прогнозувати властивості нових, ще не синтезованих сполук і таким чином ідентифікувати перспективні матеріали для подальшого вивчення. Розробка нових матеріалів ШІ допомагає у дизайні *de novo* (з нуля) матеріалів, пропонуючи нові хімічні формули або кристалічні структури, що відповідають бажаним критеріям. Однак, незважаючи на значні успіхи, впровадження ШІ у матеріалознавство стикається з певними викликами. Для вже відомих матеріалів прогнозування гіпотетичного рівня фізичних, хімічних, механічних та інших властивостей матеріалів на основі їхнього складу та структури включає використання методів машинного навчання (наприклад, нейронних мереж чи опорних векторних машин), які базуються на великих, високоякісних та релевантних наборах даних для ефективного навчання ШІ-моделей. Часто дані з матеріалознавства фрагментовані або важкодоступні. Окрім того, деякі складні моделі ШІ (наприклад, глибокі нейронні мережі (ГН)) можуть бути «чорними скриньками», що ускладнює розуміння того, як саме вони роблять свої прогнози. Це може бути проблемою для вчених, які прагнуть отримати глибше розуміння фундаментальних механізмів. Крім того, успішне впровадження ШІ вимагає тісної співпраці між матеріалознавцями, фахівцями з даних та експертами з інформатики. Ще однією проблемою є небажання провідних наукових установ, фірм, фондів, консорціумов ділитися даними з широкою аудиторією, бо такі дані часто мають велику комерційну цінність.

Попри ці виклики, перспективи ШІ у матеріалознавстві є надзвичайно широкими. Очікується,

що ШІ значно прискорить відкриття нових матеріалів для енергетики (сонячні батареї, батареї нового покоління), медицини (біосумісні імпланти, системи доставки ліків), електроніки (напівпровідники, напівпровідники) та багатьох інших галузей. З розвитком обчислювальних потужностей та вдосконаленням алгоритмів ШІ його роль у матеріалознавстві буде тільки зростати, знаменуючи новий етап наукових відкриттів та технологічних проривів.

Методи та методики дослідження. Сутність використання ШІ полягає у залученні алгоритмів машинного навчання для передбачення фізичних, хімічних, механічних, термічних, електричних та інших властивостей матеріалів, виходячи з їхнього складу та структури [5; 6; 7; 8]. Спочатку проходять збір та підготовка даних, оскільки для ефективного навчання ШІ-моделей потрібні великі обсяги якісних даних. Ці дані можуть включати тип ґратки, параметри комірки, симетрію, склад матеріалу, співвідношення елементів, наявність домішок, розмір зерен, фазовий склад, пористість, міцність на розрив, модуль Юнга, електропровідність, теплопровідність, температуру плавлення, оптичні властивості тощо [9; 10]. Також у систему вводяться умови синтезу/обробки: температура, тиск, час реакції, швидкість охолодження. Потім проводиться виділення ознак (Feature Engineering), і цей етап є критично важливим. ШІ-моделі працюють з числовими даними, тому властивості матеріалу потрібно перетворити на відповідні числові ознаки. Наприклад, для опису атомного складу можуть використовуватися такі ознаки, як атомні номери, електронегативність, радіуси атомів, енергії іонізації. Для кристалічної структури – параметри ґратки або топологічні дескриптори. Далі, залежно від типу завдання, проводиться вибір моделі машинного навчання. При цьому можуть використовуватися різні моделі, наприклад регресія – для безперервних властивостей, класифікація – для дискретних.

Для більш простих задач підходять лінійні/логістичні регресії. Це простіші моделі, корисні для виявлення лінійних залежностей. Опорні векторні машини (Support Vector Machines – SVM) є ефективними для завдань класифікації та регресії, особливо коли дані не є лінійно розділними. Для багаторівневих систем добре підходять нейронні мережі, здатні виявляти складні, нелінійні взаємозв'язки між вхідними

даними та вихідними властивостями. Може бути вибрано й інші моделі, такі як випадковий ліс (Random Forest) або градієнтний бустинг (Gradient Boosting), чи ансамблеві методи, що добре працюють з різнорідними даними і можуть забезпечити високу точність прогнозування. Після вибору способу машинного навчання відбувається валідація моделі. На жаль, прогнози ШІ потребують експериментальної валідації, що може бути часозатратним і дорогим.

Алгоритми ШІ використовуються для оптимізації стану матеріалу моделі, в які внесено вплив умов синтезу (температура, тиск, час реакції), методів обробки (термічна обробка, формування деформацій). Це значно скорочує час, необхідний для пошуку відносно простих матеріалів з бажаними характеристиками.

У складних системах матеріалів часто існують нелінійні та неочевидні залежності. ШІ-моделі здатні виявляти ці приховані кореляції, надаючи глибше розуміння поведінки матеріалів на атомарному та мікроструктурному рівнях. ШІ дає змогу моделювати взаємозв'язки між складом, структурою, процесом виробництва та властивостями матеріалів. Це дає змогу точно налаштовувати параметри для досягнення оптимальних характеристик, таких як міцність, теплопровідність, електрична провідність.

ШІ-інструменти ефективно обробляють великі масиви даних, отриманих з експериментів (наприклад, рентгенівська дифракція, електронна мікроскопія), для виявлення закономірностей та інтерпретації результатів. Моделі ШІ можуть прогнозувати дефекти, оптимізувати параметри процесу та контролювати якість продукції в режимі реального часу, використовуючи мікроструктурний контроль для досягнення бажаних властивостей. Алгоритми комп'ютерного зору, керовані ШІ, успішно працюють для автоматичного аналізу мікрофотографій матеріалів (отриманих за допомогою растрової електронної та просвічуючої мікроскопії) для ідентифікації фаз, вимірювання розміру зерен, виявлення тріщин та інших дефектів. Застосування ШІ для аналізу даних про експлуатацію матеріалів дає змогу прогнозувати їхню довговічність та швидкість деградації в різних умовах, що є критично важливим для забезпечення надійності та безпеки інженерних систем [11; 12].

Результати. Штучний інтелект у матеріалознавстві застосовується в багатьох країнах, що мають потужні науково-дослідні центри та розвинену промисловість. Однак є значні відмінності у постановці задач та цілей під час використання штучного інтелекту. Розглянемо

ці особливості на прикладі конкретних країн та окремих компаній.

Сполучені Штати Америки є одним з лідерів у впровадженні ШІ у матеріалознавство. Вони активно інвестують у дослідження та розроблення, створюючи інфраструктуру та співпрацюючи між академічним сектором, державними установами та промисловістю. Державна ініціатива та фінансування Materials Genome Initiative (MGI) почалося ще у 2011 році. MGI мала на меті прискорити відкриття, розробку та впровадження нових матеріалів, поєднуючи обчислювальні, експериментальні та цифрові підходи. Національний науковий фонд National AI Research Institutes (NSF) у співпраці з іншими федеральними агентствами заснував мережу Національних інститутів досліджень ШІ, які включають центри, що займаються фундаментальними дослідженнями ШІ, а також застосуванням ШІ в різних наукових галузях, включно з матеріалознавством. National Institute of Standards and Technology (NIST) активно працює над розробленням стандартів та інструментів для застосування ШІ в матеріалознавстві, зокрема проводячи семінари "Artificial Intelligence for Materials Science (AIMS)" для обговорення викликів та можливостей. Зараз активно працює Національна ініціатива ШІ (National AI Initiative Act of 2020), і вона передбачає розширення доступу дослідників до обчислювальних ресурсів та високоякісних даних, що є критично важливим для ШІ в матеріалознавстві. Американські дослідники широко використовують поєднання теорії функціоналу густини (DFT) та машинного навчання (ML) для прогнозування фізико-хімічних властивостей нових матеріалів, включно з енергією формування, електронними властивостями та механічними характеристиками.

Міністерство енергетики США Department of Energy (DOE) через свої національні лабораторії (наприклад, Аргонська національна лабораторія (Argonne National Laboratory), Національна лабораторія Оук-Ридж (ORNL)) є активним замовником використання ШІ для матеріалознавства, особливо в галузі енергетики (матеріали для батарей, ядерні матеріали, суперпровідники). Аргонська національна лабораторія використовує ШІ для дослідження методів обробки полімерів. Також окремим досягненням США є автономні лабораторії та високопродуктивний скринінг завдяки так званій концепції самокерованих лабораторій (Self-Driving Labs), де ШІ планує, виконує та аналізує експерименти без втручання людини. Такий підхід дає змогу швидко досліджувати величезні «простори» матеріалів та умов синтезу. Наприклад,

Google DeepMind (GNoME) з проєктом GNoME (Graph Networks for Materials Exploration) є яскравим прикладом застосування глибокого навчання для прогнозування стабільності нових неорганічних кристалів. Це дало змогу генерувати мільйони потенційно стабільних матеріалів, значно розширивши відомий матеріальний простір. Microsoft Research (MatterGen та MatterSim) також активно інвестує в AI4Science, розробляючи моделі, подібні до MatterGen, які можуть генерувати нові матеріали «з нуля» на основі заданих властивостей. MatterSim більше використовується для перевірки стабільності та життєздатності цих матеріалів.

Конкретними напрямками застосування ШІ у США є прискорення розроблення матеріалів для наступного покоління батарей, включно з твердотільними електролітами, новими катодними та анодними матеріалами для електромобілів та стаціонарного зберігання енергії (акумулятори). ШІ допомагає хімікам у відкритті та оптимізації каталізаторів для хімічних реакцій, включно з каталізаторами для виробництва палив та пластику. ШІ для матеріалознавців-металознавців використовується для проєктування високотемпературних сплавів та матеріалів для аерокосмічної галузі. Це сплави з покращеними властивостями для екстремальних умов, наприклад, для турбінних лопаток та ракетних двигунів. Фірма Intelligent Manufacturing застосовує ШІ для оптимізації виробничих процесів, таких як адитивні технології (3D-друк металів), зварювання та термічна обробка. США прагнуть зберегти своє лідерство у наукових відкриттях та технологічних інноваціях, і ШІ в матеріалознавстві розглядається як критично важливий інструмент для досягнення цих цілей. ШІ залучають для вирішення проблеми розроблення нових матеріалів з унікальними квантовими властивостями, які можуть бути використані в квантових комп'ютерах та сенсорах. Таким чином, на прикладі США можна сказати, що співпраця між дослідницькими групами, доступ до високопродуктивних обчислень та великих обсягів даних є основою для успішного впровадження ШІ у матеріалознавчу сферу.

Китай також активно і широко використовує штучний інтелект (ШІ) у матеріалознавстві, інвестуючи значні ресурси в цю галузь. Це є частиною його ширшої стратегії становлення лідером у сфері ШІ та науки. Уряд Китаю надає великого значення інтеграції ШІ та наукових досліджень у рамках національних програм та стратегій «Штучний інтелект для науки» (AI4S). Китай активно створює відкриті платформи та заохочує академічні установи відкривати свої

ресурси даних для розвитку AI4S. У березні 2023 року Міністерство науки і технологій та Національний фонд природничих наук Китаю запустили спеціальну ініціативу «План реалізації наукових досліджень, керованих штучним інтелектом (2022–2025)», щоб підтримати використання інструментів ШІ у фундаментальних науках, включно з матеріалознавством. Багато дослідницьких ініціатив у Китаї залучають співпрацю між провідними університетами, такими як Університет Цінхуа, Пекінський університет, Китайською академією наук та великими промисловими компаніями. Ця співпраця сприяє швидшому переходу від фундаментальних досліджень до практичного застосування. Озвучена мета – вирішення основних проблем, таких як зміна клімату, енергетичний перехід, розробка ліків та нових матеріалів.

Китайські дослідники активно розробляють та використовують генеративні моделі ШІ для створення абсолютно нових кристалічних структур та матеріалів з бажаними властивостями. Наприклад, деякі китайські університети та дослідницькі центри працюють над моделями, які можуть генерувати нові матеріали просто на основі їхніх функціональних вимог (наприклад, матеріали для батарей, каталізаторів та інших застосувань). Дослідницька група з Університету Цінхуа (Tsinghua University) розробила велику модель матеріалів під назвою “DeepH” (Deep-learning Density Functional Theory Hamiltonian). Ця модель використовує глибоке навчання для розрахунку гамільтоніану теорії функціоналу густини (DFT), що є фундаментальною величиною для прогнозування властивостей матеріалів. Ціль полягає у створенні універсальної моделі DeepH, здатної обробляти різноманітні матеріальні структури з більшості елементів періодичної таблиці, значно прискорюючи обчислювальне проєктування матеріалів.

Китайські лабораторії вже зараз використовують ШІ для оптимізації процесів синтезу та виробництва матеріалів. Це включає застосування алгоритмів машинного навчання для контролю параметрів росту кристалів, тонких плівок та інших матеріалів, забезпечуючи бажані властивості. Для автоматичного аналізу ШІ використовується для зображень (з електронних мікроскопів, рентгенівських апаратів та інших інструментів) задля виявлення дефектів, класифікації фаз та оцінки якості матеріалів після різних видів обробки. Окрім того, китайські компанії та дослідницькі інститути застосовують ШІ для прогнозування поведінки матеріалів у реальних умовах експлуатації, що є критично важливим для авіації, автомобілебудування та інших

галузей. Це допомагає розробленню нових сплавів з покращеними властивостями для аерокосмічної, автомобільної та інших галузей, включно зі сталлю та легкими сплавами. Велика увага приділяється матеріалам для літій-іонних батарей, твердотільних батарей та інших накопичувачів енергії. Як і США, Китай прискорює пошук нових, більш ефективних та екологічно чистих каталізаторів для хімічної промисловості за допомогою ШІ. Китай розглядає ШІ як ключовий інструмент для досягнення технологічної незалежності та лідерства, і матеріалознавство є однією з пріоритетних галузей, де ШІ вже відіграє та продовжуватиме відігравати значну роль.

Крім США та Китаю, багато інших країн активно використовують ШІ у матеріалознавстві, роблячи значний внесок у розвиток цієї галузі. Так, уряд Японії виділяє значні кошти на розвиток ШІ для промислового застосування. Матеріалознавці Японії, добре відомі своїми інноваціями в робототехніці та передовими технологіями, активно застосовують ШІ для прискорення досліджень матеріалів. Дослідницькі групи в японських університетах (наприклад, Токійський університет) та промислових компаніях (наприклад, Panasonic, Toyota) використовують ШІ для розроблення нових електродних матеріалів та електролітів для літій-іонних батарей, твердотільних батарей та інших накопичувачів енергії. В Японії досліджують застосування ШІ для прогнозування та оптимізації властивостей металевих сплавів, включно зі сталлю та титановими сплавами, для використання в аерокосмічній та автомобільній промисловості. ШІ допомагає прогнозувати стабільність, ємність та безпеку нових матеріалів, а також оптимізувати процеси їхнього синтезу.

Японські компанії, такі як Toshiba та Hitachi, використовують ШІ для оптимізації процесів виробництва напівпровідників, контролю

якості та виявлення дефектів у кристалічних структурах. Інтелектуальний аналіз матеріалів є фундаментальним методом для автоматичного розпізнавання та класифікації властивостей матеріалів, а також для визначення їхньої якості та стану. Цей процес інтегрує передові технології, такі як машинне навчання, обробка зображень та технологія оптичних датчиків, для досягнення високої точності та ефективності. Компанія Toshiba зробила значний прорив у цій галузі, успішно розробивши технологію штучного інтелекту для монокулярної камери з функцією 3D-розпізнавання [13]. Останніми роками технологія розпізнавання зображень набула надзвичайної важливості в багатьох сферах застосування. Наприклад, це роботи, здатні захоплювати та переміщувати об'єкти, системи безпілотних автомобілів та виявлення інфраструктури за допомогою дронів. Такі застосування вимагають не лише створення візуальних зображень об'єктів, але й компактних пристроїв для аналізу тривимірних даних, зокрема форми та відстані до об'єктів. Отже, використання технологій вимірювання за допомогою монокулярних камер, які легше мініатюризувати, привернуло значну увагу. Сучасні дослідження все більше концентруються на застосуванні монокулярних камер для вдосконалення технології визначення відстані через глибоке навчання, що дає змогу краще розуміти форму, фон та інші елементи сцени зображуваного об'єкта. Toshiba успішно використала модуль глибокого навчання, навчений за допомогою моделі глибокої нейронної мережі, для виконання аналізу нечітких даних на зібраних зображеннях. Шляхом ітеративного навчання мережа постійно оновлюється для мінімізації похибки між вимірюною та фактичною відстанню (рис. 1).

Окреме питання – це можливості використання штучного інтелекту як контролюючих систем. Наприклад, в Україні гірничо-металургійна

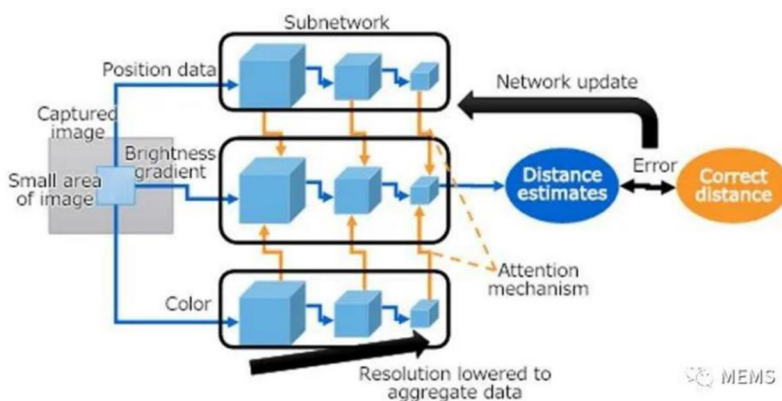


Рис. 1. Нейронна мережа, розроблена Toshiba для функції тривимірного розпізнавання монокулярної камери

група «Метінвест» запровадила на своєму підприємстві ШІ-рішення для контролю якості виробництва [14]. Штучний інтелект виявляє дефекти під час виробництва слябів – металургійного напівфабрикату, з якого виготовляється листовий прокат на заводі «Запоріжсталь».

Робоча назва рішення – ForgeCheck. Прогнозована економія на рік – \$250 000. Використовувати ШІ для контролю якості продуктів на «Запоріжсталі» компанія почала в червні 2024 року. Рішення допомагає працівнику швидше визначити брак під час обрізання слябів. Точність моделі наразі складає 75–85 %, але з урахуванням одноманітності об'єктів точність моделі можна підняти до 97 %. Основна економія для «Метінвесту» – зниження відсотка рекламаций від замовників та заощадження електроенергії, бо нагрітий метал не простоє через затримку сляба на етапі обрізання. Потенційно «Метінвест» готовий продавати розробку конкурентам. Наразі триває робота над удосконаленою моделлю, що дасть змогу підвищити ефективність та сформулювати пропозицію для потенційних партнерів.

Німеччина має власну федеральну стратегію ШІ, яка передбачає значні інвестиції в дослідження та розробки ШІ, включно з їх застосуванням у матеріалознавстві. Німеччина, відома сильною інженерною та виробничою базою, інтегрує ШІ для прискорення розробки матеріалів у таких секторах, як автомобілебудування, машинобудування та хімічна промисловість. Німецькі дослідницькі інститути (наприклад, Фраунгоферські інститути, Інститут Макса Планка) та промислові гіганти (наприклад, BASF, Siemens, Volkswagen) за програмою «Промисловість 4.0 та матеріали» використовують ШІ для оптимізації виробничих процесів з використанням нових матеріалів. Це включає прогнозування поведінки матеріалів під час обробки (наприклад, зварювання, 3D-друк) та контроль якості в режимі реального часу. ШІ застосовується для дизайну та оптимізації високопродуктивних полімерних матеріалів та композитів для автомобільної, аерокосмічної та будівельної галузей. Такі матеріали дають змогу зменшити вагу автомобілів, літаків, приладів, верстатів та підвищити їхню міцність. Німецькі хімічні компанії, як США та Китай, активно використовують ШІ для розробки нових каталізаторів, що дає змогу оптимізувати хімічні процеси та зменшити їхній екологічний вплив.

Південна Корея, світовий лідер у сфері електроніки, активно використовує ШІ для інновацій у матеріалах для дисплеїв, напівпровідників та акумуляторів. Samsung та LG, провідні виробники дисплеїв, використовують ШІ для розробки

нових органічних світловипромінювальних діодів (OLED) та інших матеріалів для дисплейних технологій, що дає змогу досягти кращої яскравості, кольору та енергоефективності. Корейські компанії, такі як Samsung та SK Hynix, застосовують ШІ для оптимізації процесів виробництва мікросхем, від проєктування нових матеріалів для транзисторів до контролю якості на етапі виробництва. Південна Корея є одним з лідерів у виробництві батарей (наприклад, фірми "LG Chem" та "Samsung SDI"), і ШІ широко використовується для проєктування та тестування нових матеріалів для електродів, електролітів та сепараторів, щоб покращити щільність енергії, термін служби та безпеку батарей.

Канада активно розвиває ШІ як у фундаментальних дослідженнях, так і в їхньому застосуванні, включно з матеріалознавством, з акцентом на енергетичні матеріали та видобувну промисловість. Канадські дослідники використовують ШІ для оптимізації матеріалів для паливних елементів, сонячних батарей та систем зберігання водню. ШІ застосовується для аналізу даних про гірські породи та руди, прогнозування їхніх властивостей та оптимізації процесів видобутку та переробки. Також дослідження зосереджені на «розумних матеріалах та сенсорах», використовуючи ШІ для їх проєктування та інтеграції в складні системи.

Велика Британія має сильну наукову базу та зосереджується на застосуванні ШІ у фундаментальних дослідженнях матеріалів, а також у таких галузях, як аерокосмічна та енергетична промисловість. Дослідницькі групи в британських університетах (наприклад, Кембриджський університет) використовують ШІ для прогнозування та відкриття матеріалів «перспективної поведінки», тобто нових матеріалів з унікальними властивостями, такими як суперпровідники або топологічні матеріали. ШІ застосовується для проєктування та оптимізації композитних матеріалів для аерокосмічної промисловості, допомагаючи передбачити їхню поведінку під навантаженням та оптимізувати виробничі процеси. У сфері ядерної енергетики ШІ використовується Англією для прогнозування поведінки матеріалів у екстремальних умовах (високі температури, радіація) та для розроблення більш стійких та безпечних компонентів реакторів.

Зрештою, інтеграція цих нових методологій, основаних на ШІ, вимагає радикальної зміни фундаментальних принципів розробки сплавів та зміну самої парадигми в розробленні сплавів. Традиційне проєктування сплавів значною мірою спиралось на емпіричні знання та передбачувані взаємозв'язки між складом і властивостями.

Традиційно сплави складалися з базового металу, «покращеного» додаванням другорядних елементів, які доповнювали його переваги або мінімізували його недоліки. Кількість легуючих елементів зазвичай обмежувалася потенційним утворенням небажаних вторинних фаз, таких як крихкі інтерметаліди. Однак у 2004 році Кантор [17] та Є [18] запропонували можливість створення монофазних мікроструктур із суміші п'яти або більше елементів, що утворюють єдиний твердий розчин. Ця пропозиція принципово змінила критерії для досягнення твердого розчину, відійшовши від правил Юма-Ротері [17; 18]. Найважливішою характеристикою конструкції стала ентропія змішування, оскільки досягнення високої ентропії змішування в розробленому сплаві збільшує енергію Гіббса, необхідну для утворення інтерметалевих сполук, і може сприяти утворенню унікальної одиничної фази. Впровадження концепцій високої ентропії, передового обчислювального моделювання та стратегій ШІ, заснованих на великому об'ємах даних, вимагає прийняття раніше нерозглянутих концепцій та стратегій. Це приводить до зміни парадигми в матеріалознавстві та інженерії (ММІ), оскільки фокус переходить від виключно оптимізації складу до врахування інноваційних параметрів мікроструктурного проєктування та нових методів обробки. Цей новий підхід дає змогу розробляти більш стійкі, високоефективні матеріали з широким спектром застосування. Наприклад, розробка високоентропійних сплавів (ВЕС) ознаменувала зміну парадигми в проєктуванні сплавів, відходячи від традиційних

методів, які надають пріоритет домінантному основному металу, посиленому другорядними елементами [15; 16]. Натомість ВЕС включають кілька легуючих елементів без жодного домінуючого компонента, розширюючи можливості проєктування сплавів. Цей зсув у мисленні привів до створення різноманітних сплавів із сімействами високоентропійних систем (ВЕН), включно з високоентропійними сталями, надсплавом та інтерметалідами, кожен з яких підкреслює необхідність врахування додаткових факторів, таких як енергія дефектів пакування (ЕДП), невідповідність кристалічної решітки та енергія антифазної межі (ЕАФМ), через їхній значний вплив на мікроструктуру та характеристики (рис. 2).

Використання кількох елементів у легуванні відкриває перспективні можливості для розроблення нових сплавів з багатокомпонентного брухту та електронних відходів, зменшуючи залежність від критичних металів та підкреслюючи необхідність передових методів генерації даних. З огляду на величезні можливості, що пропонуються цими багатокомпонентними сировинами, інструменти на основі моделювання та штучного інтелекту є важливими для ефективного дослідження та оптимізації нових сплавів, підтримуючи сталий прогрес у металургії та машинобудуванні. Ці досягнення вимагають переосмислення структури проєктування сплавів, з акцентом на надійному зборі даних, альтернативних параметрах проєктування та передових обчислювальних інструментах замість традиційних методологій, орієнтованих на склад сплаву.

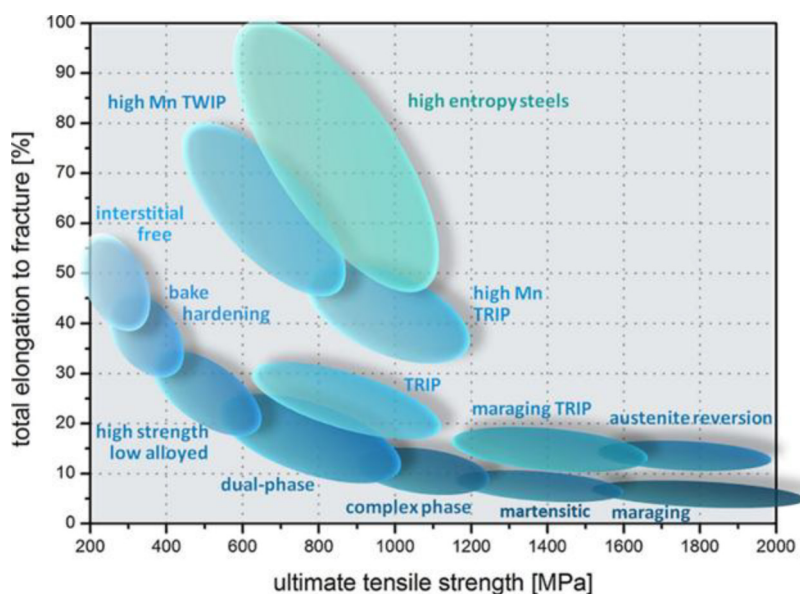


Рис. 2. Властивості на розтяг сталей з високою ентропією порівняно з багатьма традиційними аустенітними сталями Fe–Cr–Ni [21]

Основна концепція базується на двох ключових принципах: проєктування за мікроструктурою, а не за складом, та використання альтернативних концепцій (замість традиційних, безпосередньо пов'язаних з прогнозованим впливом конкретних елементів) як динамічних елементів у бажаній мікроструктурі. Мета полягає в тому, щоб мінімізувати залежність від конкретної сировини, роблячи розроблення сплавів більш стійкою. Застосовуючи ці критерії як параметри проєктування, можемо перевірити включення будь-якого елемента до кінцевої рецептури сплаву, уникаючи виключення елементів, які зазвичай вважаються небажаними в електронних відходах та металобрухті.

Проектуючи мікроструктури на основі високої конфігураційної ентропії суміші, можемо зняти обмеження на легуючі елементи. Як основні, так і менші елементи можуть використовуватися вільно, що дає змогу будь-якому легуючому елементу позитивно впливати на проєктування без обмежень щодо складу. Цей підхід спрямований на проєктування сплавів

з високою ентропією (НЕА/МРЕА/АНЕ), таких як високоентропійні сталі, високоентропійні надсплави або високоентропійні інтерметаліди.

У 2021 році Товариство мінералів, металів та матеріалів (TMS) [19] опублікувало звіт 15 міжнародних експертів, підготовлений за фінансування двох американських оборонних відомств, у якому окреслено шляхи реалізації революційного потенціалу ВЕС. У звіті було запропоновано дев'ять рекомендацій, зокрема «високопродуктивні методи скринінгу та експериментальні інструменти», «моделі прогнозування структури та властивостей та обчислювальні інструменти», «обладнання для високотемпературних випробувань та обробки», «методи характеристики *in situ*» та «термодинамічні бази даних для складних концентрованих комбінацій сплавів (розрахунок фазових діаграм (CALPHAD))» [20].

Наприклад, для подальшого розширення сфери застосування сплавів на основі заліза з високою ентропією (ВЕС) було розроблено білий чавун з високою ентропією з використанням цього підходу [22; 23; 24].

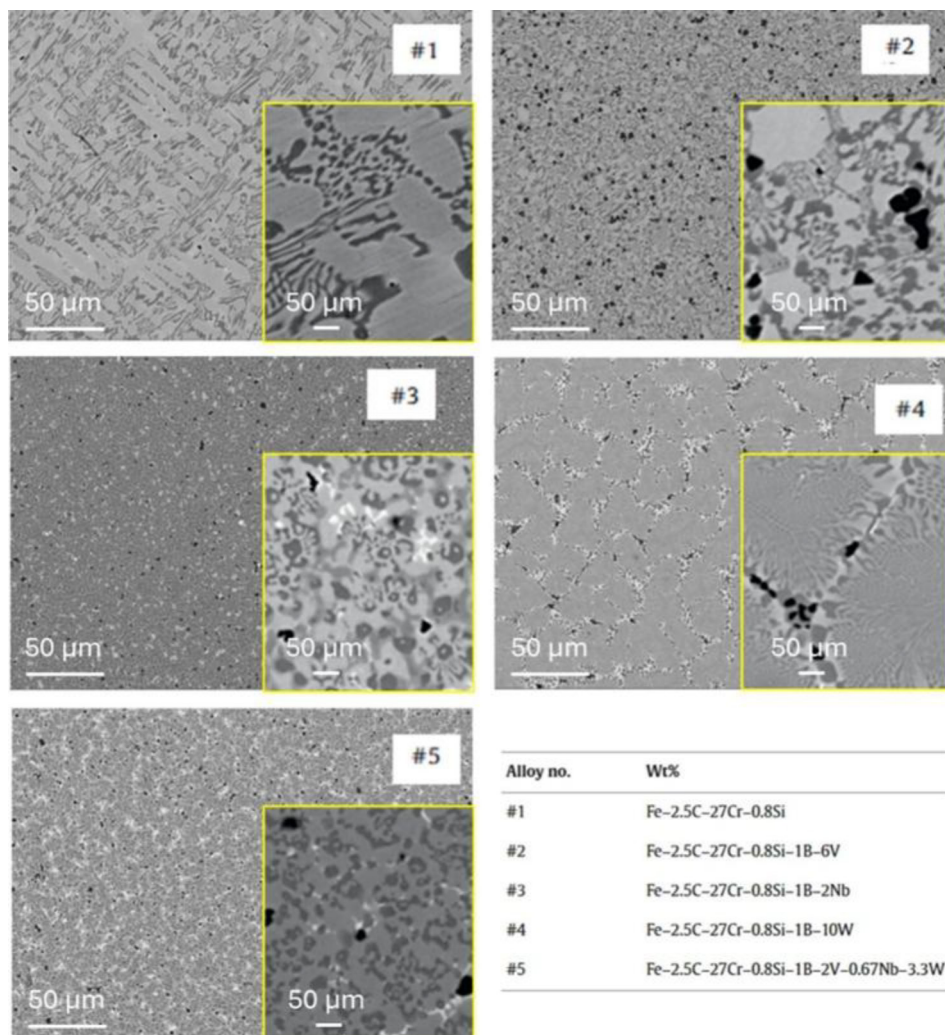


Рис. 3. Мікроструктура виготовленого чавуну з високою ентропією

У цьому разі ефект високої ентропії не використовується в мікроструктурі. Натомість, дотримуючись концепції МРЕА, до базового складу чавуну (наприклад, Fe-20Cr-5C) додаємо велику кількість карбідоутворюючих елементів. У розплавленому стані конфігураційна ентропія висока, але під час затвердіння ці карбідоутворюючі елементи конкурують за утворення карбідів. Ця конкуренція пригнічує ріст карбідів, що призводить до утворення рафінованих карбідів. Основною метою тут є підвищення твердості, що успішно досягається, оскільки мікроструктура зберігає типову структуру білого чавуну, але зі значним збільшенням дрібних карбідних виділень. На рис. 3 показано, як збільшення кількості конкуруючих легуючих елементів приводить до рівномірно розподілених дрібних карбідів. У сплаві № 1 мікроструктура демонструє гіпоевтектичний склад чавуну, що характеризується первинним аустенітом та евтектичними карбідами. Інші чотири сплави розроблені поблизу евтектичної точки для покращення твердості без грубих первинних карбідів. У сплавах № 2–5 ми бачимо, як додавання бору, ванадію та ніобію покращує мікроструктуру. Більше збільшення показує такі фази, як первинний аустеніт, карбіди M₇C₃, а також карбіди ванадію та ніобію. Сплав № 4 демонструє евтектичну комірчасту структуру з карбідом вольфраму, а сплав № 5 має набагато складнішу мікроструктуру.

Незважаючи на технологічний прогрес, залишаються значні перешкоди у ширшому застосуванні штучного інтелекту для прискорення відкриття ВЕС. Дефіцит маркованих та немаркованих наборів даних (особливо тих, що корелюють параметри обробки, мікроструктурні особливості та результуючі властивості) перешкоджає надійному навчанню моделей. Більше того, наявні підходи машинного навчання часто не мають критичних даних для технологічності, включно з термічною стабільністю та окислювальною поведінкою, що призводить до прогнозів, які можуть бути нездійсненними для реального виробництва. Поєднання термодинамічних симуляцій з моделюванням на основі ШІ може допомогти усунути цю прогалину, надаючи фізично обґрунтоване розуміння правил фазоутворення, поведінки плавлення та кінетики дифузії.

Висновки. Використання штучного інтелекту вже привело до змін у традиційному проєктуванні матеріалів, що було зосереджено на оптимізації мікроструктур для високоефективних сплавів. Зараз сформульовані альтернативні критерії, такі як висока ентропія змішування, енергія дефектів пакування,

невідповідність кристалічної решітки та енергія антифазної межі, що тепер інтегровані в процес проєктування. Здійснюється поступовий перехід до використання сплавів з кількома компонентами, без пріоритезації чи відкидання будь-якого з них. Використання металобрехту та електронних відходів відкриває мільйони можливих комбінацій сплавів. Було виявлено, що наявність численних елементів у сплаві без потреби визначення пріоритетів або відкидання будь-якого конкретного компонента забезпечує суттєві переваги. Поява можливостей зробити з них промислові матеріали забезпечує можливість для сталого постачання матеріалів та скорочення відходів. Таким чином, розглянуті у статті підходи до використання ШІ вже активно формують майбутнє матеріалознавства, відкриваючи нові можливості для створення матеріалів з покращеними та унікальними властивостями для широкого спектру застосувань, а прогнозування властивостей матеріалів за допомогою ШІ є одним з найбільш фундаментальних і широко застосовуваних у матеріалознавстві.

Традиційні методи спроб і помилок більше не є достатніми для ефективного дослідження складності цих сплавів. Штучний інтелект (ШІ) відіграє вирішальну роль у прискоренні процесу проєктування сплавів. Підходи на основі ШІ, зокрема машинне навчання та моделювання на основі даних, можуть прогнозувати поведінку різних складів сплавів на основі великих наборів даних, забезпечуючи вибір найперспективніших рецептур. Використання ШІ дає змогу ефективно орієнтуватися у величезному просторі можливих комбінацій сплавів, оптимізуючи як проєктування, так і продуктивність цих матеріалів. Це приводить до зміни парадигми в матеріалознавстві та інженерії (MMI), оскільки фокус переходить від виключно оптимізації складу до врахування інноваційних параметрів мікроструктурного проєктування та нових методів обробки. Цей новий підхід дає змогу розробляти більш стійкі, високоефективні матеріали з широким спектром застосування.

Таким чином, ШІ є потужним інструментом, що дає змогу значно прискорити та оптимізувати процес розроблення нових матеріалів. Дані в матеріалознавстві відіграють вирішальну роль у покращенні нашого розуміння властивостей матеріалів та стимулюванні інновацій у цій галузі. Очікується, що доступність різних типів даних разом з досягненнями в галузі штучного інтелекту та машинного навчання сприятимуть прискоренню відкриттю матеріалів та розробленню нових матеріалів для широкого кола застосувань.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Samarasinghe S. Neural Networks for Applied Sciences and Engineering. Auerbach Publications, Taylor and Francis group, New York, 2006. P. 570. <https://doi.org/10.1201/9780849333750>.
2. Alzubaidi L., Zhang J., Humaidi A. et al. Review of deep learning: Concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions, *J. Big Data*. 2021. 8, 53. <https://doi.org/10.1186/s40537-021-00444-8>
3. Raccuglia P., Elbert K., Adler Ph. et al. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments, *Nature*. 2016. 533, P. 73–76. <https://doi.org/10.1038/nature17439>
4. Peivaste I., Belouettar S., Mercur Fr. et al. Artificial intelligence in materials science and engineering: Current landscape, key challenges, and future trajectories. *Composite Structures*. 2025. V. 372. P. 119419 <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2025.119419>
5. Mueller T., Gilad Kusne A., Ramprasad R. Machine learning in materials – recent progress and emerging applications. *Reviews in Computational Chemistry* (John Wiley & Sons, Inc, Baltimore MD. 2016. P. 291. <https://doi.org/10.1002/9781119148739.ch4>
6. Mobarak M. H., Mimona M. A., Islam M. A. et al. *Scope of machine learning in materials research. A Review*. Appl. Surf. Sci. Adv. 2023. 18, 100523. <https://doi.org/10.1016/j.apsadv.2023.100523>
7. LeSar R. Materials informatics: An emerging technology for materials development. *Stat. Anal. Data Min.: ASA Data Sci. J.* 2009. 1, 372. <https://doi.org/10.1002/sam.10034>
8. Ford E., Maneparambil K., Rajan S. et al. Machine learning-based accelerated property prediction of two-phase materials using microstructural descriptors and finite element analysis. *Comput. Mater. Sci.* 2021. 191, 110328 <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110328>
9. Choudhary K., DeCost Br., Chen C. et al. Recent advances and applications of deep learning methods in materials science, *Nature*. 2022. 59. 8. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00734-6>
10. Zuccarini C., Ramachandran K., Jayaseelan D. et al. Stress distribution analysis in zirconium diboride and silica carbide (ZrB₂-SiC) based TPS under hypersonic flight conditions using machine learning driven approach. *Ultra-High Temperature Ceramics: Materials for Extreme Environment Applications*. 2021. URL: <https://crimsonpublishers.com/rdms/pdf/RDMS.000999.pdf>
11. Tran V.Q. Using artificial intelligence approach for investigating and predicting yield stress of cemented paste backfill. *Sustainability* 15, 2023. 2892. <https://doi.org/10.3390/su15042892>
12. Granzner M., Strauss A., Reiterer M. et al. Data-driven condition assessment and life cycle analysis methods for dynamically and fatigue-loaded railway infrastructure components. *Infrastructures*. 2023. 8 (11), 162. <https://doi.org/10.3390/infrastructures8110162>
13. Toshiba розробляє перший у світі штучний інтелект, здатний виконувати 3D-вимірювання, використовуючи лише фотографії з монокулярної камери з об'єктивом-змітом. URL: <https://www.global.toshiba/www/technology/corporate/rdc/rd/topics/21/2111-02.html>
14. Балашова Л. Метінвест запровадив ШІ для контролю якості продукції на «Запоріжсталі». *Forbes Ukraine*. 2024. URL: <https://metinvestholding.com/ua/media/news/metinvest-zaprovadiv-sh-dlya-kontrolyu-yakost-produkc-na-zaporzhstal-forbes-ukraine>
15. Zhao F., Zhang Z., Ye Y. et al. Machine learning guided prediction of dynamic energy release in high-entropy alloys. *Mater. Des.* 2024. 246. <http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113339>
16. Jordan M. I., Mitchell T. M. (2015). Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science* V. 349, Is. 6245. P. 255–260. URL: <https://www.cs.cmu.edu/~tom/pubs/Science-ML-2015.pdf>
17. Cantor B., Chang I., Knight P. et al. Microstructural Development in Equiatomic Multicomponent Alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 2004. 375. P. 213–218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
18. Yeh J.-W., Chen S.-K., Line S.-J. et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*. 2004. V. 6, Is. 5. P. 299–303. <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
19. Miracle A., Brenner D., Detor D. et al. Defining pathways for realizing the revolutionary potential of high entropy alloys. 2021. URL: <https://www.tms.org/portal/portal/Publications/Studies/heaPathways/heaPathways.aspx>.
20. Kattner U. The calphad method and its role in material and process development. *Tecnol. Em Metal. Mater. E Min.*, 2016. V.13. N. 1. P. 3–15. <http://dx.doi.org/10.4322/2176-1523.1059>
21. Raabe D., Tasan C., Springer H. et al. From high-entropy alloys to high-entropy steels. *Steel research international*. 2015. V. 86, Is. 10. P. 1127–1138. <https://doi.org/10.1002/srin.201500133>
22. Wang Y., Li D., Parent L. et al. Improving the wear resistance of white cast iron using a new concept. *High-entropy microstructure Wear*. 2011. V. 271. Is. 9–10. P. 1623–1628. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2010.12.029>

23. Wang Y. P., Li D. Y., Parent L., Tian H. Performances of hybrid high-entropy high-Cr cast irons during sliding wear and air-jet solid-particle erosion. *Wear*, 2013. V. 301. Is. 1–2. P. 390–397. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2012.12.045>
24. Pasini W., Belle M., Pereira L., F. R. et al. Analysis of carbides in multi-component cast iron design based on high entropy alloys concepts. *Materials Research*. 2021.V. 24. N. 2. <http://dx.doi.org/10.1590/1980-5373-mr-2020-0398>

REFERENCES:

1. Samarasinghe, S. (2006). *Neural Networks for Applied Sciences and Engineering*. Auerbach Publications, Taylor and Francis group, New York, 2006. P. 570. <https://doi.org/10.1201/9780849333750>
2. Alzubaidi, L., Zhang, J., Humaidi, A. et al. (2021). Review of deep learning: Concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions, *J. Big Data* 8, 53. <https://doi.org/10.1186/s40537-021-00444-8>
3. Raccuglia, P., Elbert, K., Adler, Ph. et al. (2016). Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments, *Nature*. 533, P. 73–76 (2016). <https://doi.org/10.1038/nature17439>
4. Peivaste, I., Belouettar, S., Mercur, Fr. et al. (2025). Artificial intelligence in materials science and engineering: Current landscape, key challenges, and future trajectories. *Composite Structures*. V. 372. P. 119419 <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2025.119419>
5. Mueller, T., Gilad Kusne, A., Ramprasad, R. (2016). Machine learning in materials - recent progress and emerging applications. *Reviews in Computational Chemistry* (John Wiley & Sons, Inc, Baltimore MD). P. 291. <https://doi.org/10.1002/9781119148739.ch4>
6. Mobarak, M. H., Mimona, M. A., Islam, M. A. et al. (2023). *Scope of machine learning in materials research*. A Review. *Appl. Surf. Sci. Adv.* 18, 100523. <https://doi.org/10.1016/j.apsadv.2023.100523>
7. LeSar, R. (2009). Materials informatics: An emerging technology for materials development, *Stat. Anal. Data Min.: ASA Data Sci. J.* 1, 372. <https://doi.org/10.1002/sam.10034>
8. Ford, E., Maneparambil, K., Rajan, S. et al. (2021). Machine learning-based accelerated property prediction of two-phase materials using microstructural descriptors and finite element analysis. *Comput. Mater. Sci.* 191, 110328 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110328>
9. Choudhary, K., DeCost, Br., Chen, C. et al. (2022). Recent advances and applications of deep learning methods in materials science, *Nature*. 59, 8. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00734-6>
10. Zuccarini, C., Ramachandran, K., Jayaseelan, D. et al. (2021). Stress distribution analysis in zirconium diboride and silica carbide (ZrB₂-SiC) based TPS under hypersonic flight conditions using machine learning driven approach. *Ultra-High Temperature Ceramics: Materials for Extreme Environment Applications*. <https://crimsonpublishers.com/rdms/pdf/RDMS.000999.pdf>
11. Tran, V. Q. (2023). Using artificial intelligence approach for investigating and predicting yield stress of cemented paste backfill. *Sustainability* 15, 2892. <https://doi.org/10.3390/su15042892>
12. Granzner, M., Strauss, A., Reiterer, M. et al. (2023). Data-driven condition assessment and life cycle analysis methods for dynamically and fatigue-loaded railway infrastructure components. *Infrastructures*, 8(11), 162. <https://doi.org/10.3390/infrastructures8110162>
13. Toshiba rozrobilaie pershyi u sviti shtuchnyi intelekt, zdatnyi vykonuvaty 3D-vymiriuvannia, vykorystovuiuchy lyshe fotohrafii z monokuliarnoi kamery z obiektyvom-zmitom. <https://www.global.toshiba/ww/technology/corporate/rdc/rd/topics/21/2111-02.html>
14. Balashova, L. (2024). Metinvest zaprovadyv ShI dlia kontroliu yakosti produktsii na “Zaporizhstali”. *Forbes Ukraine*. <https://metinvestholding.com/ua/media/news/metinvest-zaprovadiv-sh-dlya-kontrolyu-yakost-produkc-na-zaporizhstal-forbes-ukraine>
15. Zhao, F., Zhang, Z., Ye, Y. et al. (2024). Machine learning guided prediction of dynamic energy release in high-entropy alloys. *Mater. Des.*, 246. <http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113339>
16. Jordan, M. I., & Mitchell, T. M. (2015). Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science* V. 349. Is. 6245. P. 255–260. <https://www.cs.cmu.edu/~tom/pubs/Science-ML-2015.pdf>
17. Cantor, B., Chang, I., Knight, P. et al. (2004). Microstructural Development in Equiatomic Multicomponent Alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 375. P. 213–218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
18. Yeh, J.-W., Chen, S.-K., Line, S.-J. et al. (2004). Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*. V. 6, Is. 5. P. 299–303 <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
19. Miracle, A., Brenner, D., Detor, D. et al. (2021). Defining pathways for realizing the revolutionary potential of high entropy alloys. <https://www.tms.org/portal/portal/Publications/Studies/heaPathways/heaPathways.aspx>

20. Kattner, U. The calphad method and its role in material and process development. (2016) *Tecnol. Em Metal. Mater. E Min.* V. 13. N. 1. P. 3–15. <http://dx.doi.org/10.4322/2176-1523.1059>
21. Raabe, D., Tasan, C., Springer, H. et al. (2015). From high-entropy alloys to high-entropy steels. *Steel research international*. V. 86, Is. 10. P. 1127–1138. <https://doi.org/10.1002/srin.201500133>
22. Wang, Y., Li, D., Parent, L. et al. (2011). Improving the wear resistance of white cast iron using a new concept. *High-entropy microstructure Wear*. V. 271. Is. 9–10. P. 1623–1628. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2010.12.029>
23. Wang, Y. P., Li, D. Y., Parent, L., Tian, H. (2013). Performances of hybrid high-entropy high-Cr cast irons during sliding wear and air-jet solid-particle erosion. *Wear*. V. 301. Is. 1–2. P. 390–397. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2012.12.045>
24. Pasini, W., Belle, M., Pereira, L., F. R. et al. (2021). Analysis of carbides in multi-component cast iron design based on high entropy alloys concepts. *Materials Research*. V. 24. N. 2. <http://dx.doi.org/10.1590/1980-5373-mr-2020-0398>

Стаття надійшла: 06.08.2025

Стаття прийнята: 28.08.2025

Опублікована: 10.11.2025

