

ЦИФРОВІЗАЦІЯ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА Й НАПРЯМИ ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ

Ковальов Ю. Г., Аулін В. В., Ковальов С. Г., Кузик О. В., Гриньків А. В.
Центральноукраїнський національний технічний університет

Анотація. У статті досліджено актуальні напрями розвитку матеріалознавства в умовах цифрової трансформації та сталого розвитку. Розглянуто потенціал методів штучного інтелекту для оптимізації досліджень і моделювання властивостей матеріалів. Проаналізовано перспективні шляхи інтеграції України в глобальні науково-технологічні процеси.

Ключові слова: штучний інтелект у матеріалознавстві, Індустрія 4.0, сталий розвиток, цифрове моделювання матеріалів, інтелектуальний аналіз даних.

Вступ

Сучасне матеріалознавство переживає глибоку трансформацію, зумовлену впливом цифрових технологій і глобальних викликів сталого розвитку. Нині ми перебуваємо на перетині двох потужних тенденцій: стрімкого прогресу в галузі штучного інтелекту й переосмислення ролі матеріалів у новій промисловій парадигмі. У контексті Індустрії 4.0 змінюється не лише інструментарій дослідника, а й сама логіка наукового пошуку – від ізольованих експериментів до комплексних, інтегрованих систем, що поєднують великі дані, цифрове моделювання, хмарні обчислення й алгоритми машинного навчання [1–9].

Цей перехід відкриває нові можливості для прогнозування властивостей матеріалів, оптимізації їх складу й структури, а також прискорення циклу «від ідеї до прототипу». Матеріалознавство поступово перетворюється на кіберфізичну дисципліну, де фізичні процеси тісно переплетені з цифровими моделями й аналітичними платформами [6]. Для України це не лише виклик, але й стратегічна можливість інтегрувати в глобальні науково-технологічні процеси, посилити власний дослідницький потенціал і сприяти розвитку інноваційної економіки.

Аналіз публікацій

Вивчення наукових публікацій свідчить про стрімке зростання інтересу до впровадження штучного інтелекту в матеріалознавстві, особливо після 2018 р., що збігається з активізацією глобальних процесів цифровізації [2, 8]. Провідні дослідницькі центри з різних країн дедалі частіше зосереджуються на використанні алгоритмів машинного навчання для прогнозування фізико-хімічних властивостей матеріалів, оптимізації їх складу й структури, а також автоматизованого

дизайну нових функціональних матеріалів [5, 8, 10]. Значна частина досліджень спрямована на створення енергоефективних і екологічно безпечних рішень, що узгоджується з цілями сталого розвитку й переходом до циркулярної економіки [11, 12]. Цифрове моделювання, хмарні обчислення й аналіз великих даних стали ключовими інструментами сучасного матеріалознавства. Така трансформація відкриває нові перспективи для міждисциплінарної кооперації, прискорення інноваційного циклу й формування кіберфізичних систем у дослідницькому середовищі. [1, 3–9].

Мета й постановка завдання

Метою дослідження є виявлення актуальних напрямів розвитку матеріалознавства в умовах цифрової трансформації з особливою увагою до застосування методів штучного інтелекту для вдосконалення наукових підходів, моделювання властивостей матеріалів і підтримки принципів сталого розвитку.

Для реалізації окресленої мети було сформульовано завдання дослідження, що полягають у виявленні ключових напрямів упровадження інтелектуальних технологій у матеріалознавстві та оцінюванні перспектив цифрової трансформації в контексті сталого розвитку й міжнародної інтеграції України.

Виклад основного матеріалу

Як показав аналіз наукових статей, у сучасному матеріалознавстві змінюється сама логіка дослідницького процесу. Традиційна послідовність «гіпотеза → експеримент → аналіз» поступається місцем інтерактивним і адаптивним моделям, де цифрове моделювання, оброблення інформації та віртуальний скринінг матеріалів відіграють роль стартових етапів [11]. Зростає роль відкритих еко-

систем знань, які забезпечують доступ до структурних баз, алгоритмів і аналітичних платформ, що сприяє колективному прогресу [3, 7, 11].

Варто наголосити, що цифрові технології не замінюють дослідника, а доповнюють його інструментарій. Ефективне створення нових матеріалів можливе лише за умови поєднання глибокої предметної експертизи із сучасними засобами аналізу. У цьому контексті методи машинного й глибокого навчання є ключовими елементами нової дослідницької парадигми, орієнтованої на швидке, цільове й ресурсоефективне проєктування матеріалів (рис. 1).

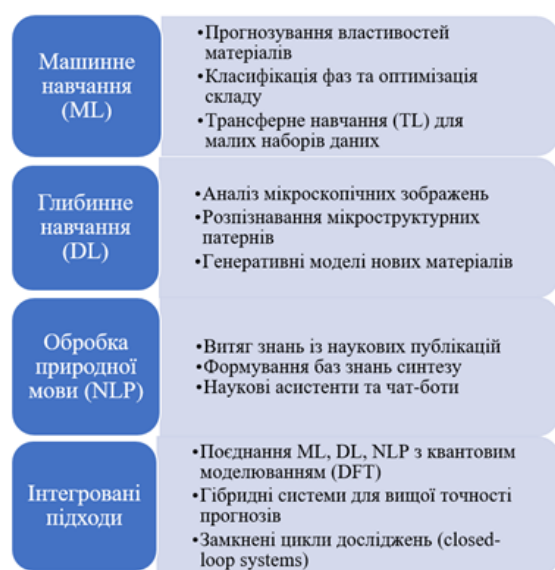


Рис. 1. Упровадження методів ШІ в матеріалознавстві

Методи машинного навчання (ML) вже активно застосовуються в матеріалознавстві для прогнозування таких фізико-хімічних властивостей матеріалів: електропровідність, теплопровідність, міцність, корозійна стійкість тощо. Наприклад, у роботі [13] використано нейронні мережі для передбачення електронної структури матеріалів на основі кристалографічних даних, що дало змогу значно скоротити тривалість часу моделювання.

У межах проєкту *Materials Genome Initiative* (США) застосовуються ML-алгоритми для створення баз даних властивостей матеріалів і автоматизованого скринінгу нових сплавів.

Зокрема методи *random forest* і *support vector machines* упроваджують для класифікації фазових станів і визначення стабільності нових композицій [14].

У сфері наноматеріалів дослідники [13] застосували глибоке навчання для прогнозування термоелектричних властивостей наноструктурованих матеріалів. Це допомогло виявити перспективи енергоефективних застосувань без проведення повного експериментального циклу.

Також активно розвиваються підходи *transfer learning* і *active learning*, що дають змогу працювати з обмеженими наборами даних. У дослідженнях з розроблення біосумісних матеріалів для імплантатів ці методи допомогли адаптувати моделі, навчені на металічних сплавах, до аналізу керамічних структур [15].

Глибоке навчання (*Deep Learning*, DL), зокрема згорткові нейронні мережі (*Convolutional Neural Networks*, CNN), демонструє високу ефективність у роботі з візуальними даними, що є особливо актуальним для аналізу мікроструктури матеріалів. DL-моделі широко застосовуються для автоматизованого оброблення зображень, отриманих за допомогою сканувальної електронної мікроскопії (SEM), трансмісійної електронної мікроскопії (TEM) і атомно-силової мікроскопії (AFM). Це дає змогу ідентифікувати дефекти, пори, тріщини, а також аналізувати зернисту структуру з високою точністю та повторюваністю [16].

Завдяки здатності розпізнавати мікроструктурні патерни, класифікувати текстури й фазові вкраплення DL-алгоритми істотно знижують потребу в ручному аналізі, підвищуючи об'єктивність і швидкість досліджень. Установлення кореляцій типу «мікроструктура → властивості» стає більш доступним, що сприяє оптимізації технологічних процесів і прискоренню розроблення нових матеріалів.

Перспективним напрямом є використання генеративних моделей, зокрема генеративних змагальних мереж (*Generative Adversarial Networks*, GANs) та варіаційних автоенкодерів (*Variational Autoencoders*, VAEs) [11]. Ці моделі сприяють створенню синтетичних зображень мікроструктур, моделюванню еволюції структури під впливом зовнішніх чинників, а також прогнозуванню впливу змін у складі матеріалу на його кінцеві властивості. GAN-моделі вже застосовуються для генерації зображень наноструктурованих поверхонь, що дає змогу проводити віртуальний скринінг нових композицій без потреби у фізичних експериментах.

Отже, поєднання машинного навчання, глибокого навчання та генеративних підхо-

дів не лише прискорює формування нових матеріалів, але й сприяє появі нової дослідницької парадигми, орієнтованої на цифрову трансформацію матеріалознавства й інтелектуальне проєктування матеріалів із заданими властивостями [17].

Одним із перспективних напрямів цифровізації матеріалознавства є застосування методів оброблення природної мови (*Natural Language Processing*, NLP), які відкривають нові можливості для автоматизованого аналізу наукової літератури. Сучасні NLP-моделі здатні витягувати структуровану інформацію з тисяч публікацій, формуючи бази знань про методи синтезу, параметри оброблення та експериментальні результати. У роботі [18] розглянуто застосування великих мовних моделей (LLMs) для побудови семантичних карт знань у матеріалознавстві, що сприяє прискоренню оглядових досліджень і генерації нових гіпотез. Крім того, у праці [19] оцінено ефективність 15 LLM-моделей розв'язувати питання з матеріалознавства, де найвищі результати продемонстрували GPT-4o та Claude-3.5.

Інтеграція NLP з іншими цифровими підходами ML, DL та методами квантового моделювання (зокрема теорією функціоналу густини, DFT і молекулярною динамікою) забезпечує формування гібридних дослідницьких систем. У таких системах DL використовується для аналізу мікроструктурних зображень, ML – для статистичного оцінювання властивостей, а NLP – для семантичного узагальнення знань з літератури. Це підвищує точність прогнозів, адаптивність моделей і ефективність дослідницького процесу.

Віртуальні експерименти (*in silico*) стали невід'ємним складником сучасного матеріалознавства, забезпечуючи масштабованість, швидкість і цільову спрямованість досліджень. Завдяки високошвидкісним симуляціям у поєднанні з методами активного навчання (*active learning*) дослідники отримують змогу протестувати сотні тисяч гіпотетичних матеріалів у комп'ютерному середовищі, що дає змогу оперативно ідентифікувати найбільш перспективні структури для подальшого синтезу.

Інтеграція таких підходів у замкнені дослідницькі цикли (*closed-loop systems*) відкриває нові можливості для автономного наукового пошуку. У межах цих систем штучний інтелект самостійно генерує гіпотези, перевіряє їх за допомогою симуляцій або експериментальних показників і на основі отриманих результатів вдосконалює власні моделі.

Отже, поєднання віртуальних експериментів, глибокого навчання, NLP і квантового моделювання формує основу нової дослідницької парадигми, орієнтованої на швидке, адаптивне й ресурсоефективне створення матеріалів із заданими властивостями. Сучасні цифрові матеріалознавчі платформи (рис. 2), що поєднують бази даних, інструменти моделювання й алгоритми штучного інтелекту, формують нову інфраструктуру досліджень у матеріалознавстві. Ці інструменти не замінюють дослідника, а розширюють його можливості, забезпечуючи більш глибоку аналітику, вищу точність прогнозів і стратегічну перевагу в умовах глобальної конкуренції.



Рис. 2. Цифрові матеріалознавчі платформи

У контексті цифрової трансформації матеріалознавства особливу роль відіграють відкриті та комерційні платформи, що забезпечують доступ до великих масивів структурованих даних, інструментів моделювання й засобів інтеграції з алгоритмами штучного інтелекту. Однією з найвпливовіших у цій сфері є *Materials Project* [1], створена в США на базі Національної лабораторії Лоуренса в Берклі. Платформа функціонує як відкритий репозиторій матеріалознавчої інформації, що охоплює понад 200 тис. матеріалів, для яких розраховано електронні, механічні, магнітні та термодинамічні властивості з використанням методів *Density Functional Theory* (DFT) [11].

Materials Project [11] надає дослідникам широкий набір інструментів, зокрема для моделювання кристалічних структур, побудови фазових діаграм, аналізу стабільності фаз, оцінювання електронної провідності та прогнозування реакційної енергії. Інтерфейс платформи допомагає здійснювати пошук за хімічним складом, просторовою групою, енергетичними критеріями та іншими параметрами, що значно спрощує навігацію в складному багатовимірному просторі матеріалів.

Окремо важливо наголосити на можливості інтеграції платформи з власними програмними рішеннями за допомогою *Application Programming Interface* (API) [11], що відкриває шлях до автоматизованого скринінгу, побудови ML-моделей і реалізації замкнених дослідницьких циклів. *Materials Project* активно використовується в академічних і промислових дослідженнях, зокрема з метою прискореного розроблення катодних матеріалів для літій-іонних батарей, де віртуальний скринінг дав змогу ідентифікувати перспективні композиції з високою енергетичною щільністю та термодинамічною стабільністю. Отже, *Materials Project* є не лише джерелом даних, а й інструментом стратегічного планування досліджень, який сприяє поєднанню теоретичних розрахунків, машинного навчання та експериментальної верифікації в єдиному цифровому середовищі.

У межах європейських ініціатив цифрової трансформації матеріалознавства особливе місце посідає платформа *NOMAD Repository* (*Novel Materials Discovery*) [3, 4]. Вона спрямована на створення відкритої, стандартизованої та масштабованої інфраструктури для збереження, обміну й повторного використання матеріалознавчої інформації. Основою платформи є принципи FAIR (*Findable, Accessible, Interoperable, Reusable*), що забезпечують прозорість, доступність і довгострокову цінність наукової інформації [7].

Платформа *NOMAD* обробляє інформацію з численних джерел – від електронно-структурних розрахунків до експериментальних результатів – і перетворює їх у єдиний формат із багатими метаданими, що допомагає здійснювати пошук, фільтрацію та порівняння між різними наборами. Платформа підтримує широкий спектр симуляційних кодів (*VASP*, *Quantum ESPRESSO*, *GPAW*, *ABINIT* тощо) та забезпечує автоматичне вилучення параметрів, структур, енергетичних і термодинамічних властивостей.

Особливістю платформи *NOMAD* є можливість локального розгортання через систему *NOMAD Oasis*, яка допомагає дослідницьким групам створювати власні архіви, інтегрувати внутрішні джерела інформації та запускати власні аналітичні інструменти. Такий підхід забезпечує гнучкість і контроль над інформацією, водночас зберігаючи сумісність із глобальним репозиторієм. Крім того, платформа *NOMAD* підтримує програмну інтеграцію через API, зокрема стандарти *OPTIMADE* та *DCAT*, що сприяє автоматизації доступу до інформації та її використанню в ML-моделях і цифрових лабораторіях.

Автори роботи [4] описують платформу *NOMAD* як розподілену вебсистему для управління матеріалознавчими даними, яка підтримує довгострокове архівування, призначення DOI, приватну модерацію та публікацію з ембарго. Це робить *NOMAD* не лише технічним інструментом, але й елементом нової культури відкритої науки, де інформація стає повноцінним науковим результатом.

Необхідно зауважити, що *NOMAD Repository* є стратегічним ресурсом для дослідників, які прагнуть забезпечити відтворюваність, відкритість і масштабованість своїх матеріалознавчих досліджень, інтегруючи їх у глобальну цифрову екосистему.

У контексті цифрової трансформації прикладного матеріалознавства особливу роль відіграють комерційні платформи, орієнтовані на промислові R&D-завдання. Однією з найвідоміших у цій категорії є *Citrine Informatic* – інформатична екосистема, що поєднує машинне навчання, хімічну експертизу та інтерпретовану аналітику для прискореного проектування матеріалів [5]. Платформа була заснована 2013 р. й набула широкого застосування в сферах полімерів, сплавів, акумуляторних матеріалів, покриттів і композитів.

Ключовою особливістю *Citrine* є використання інтерпретованих ML-моделей, які генерують прогнози й пояснюють логіку прийнятих рішень. Це забезпечує прозорість аналітики, що є критично важливим у промислових умовах, де довіра до моделі має практичне значення. Платформа оптимізована для роботи з обмеженими наборами даних, що особливо актуально для експериментальних досліджень, де повні масиви часто не доступні. Завдяки хімічно обізнаним алгоритмам *Citrine* здатна витягувати максимальну інформацію навіть із фрагментарних даних, забезпечуючи ефективне прогнозування властивостей і складу матеріалів.

Платформа *Citrine* підтримує графічний вебінтерфейс для інженерів і гнучкий *Python*-клієнт для автоматизації робочих процесів, що забезпечує доступність як для науковців, так і для дата-аналітиків. Водночас *Citrine* не претендує на інтелектуальну власність користувачів, надаючи повний контроль над інформацією та відкриту архітектуру для інтеграції з внутрішніми системами. Такий підхід сприяє довгостроковому впровадженню платформи *Citrine* в корпоративні R&D-стратегії, зберігаючи конфіденційність і гнучкість.

Зазначимо, що поєднання відкритих наукових платформ і комерційних рішень створює багаторівневу цифрову екосистему, що підтримує як фундаментальні дослідження, так і прикладні розробки, сприяючи прискоренню інноваційного циклу в матеріалознавстві.

Варто наголосити, що формування єдиного цифрового простору в матеріалознавстві не є лише технічним процесом – це трансформація наукової культури, яка передбачає нові форми взаємодії, спільного управління знаннями та колективного прийняття рішень. У межах цієї парадигми матеріальна інформатика постає як міждисциплінарна галузь, що поєднує фізику конденсованого стану речовини, хімію, обчислювальні науки, машинне навчання й наукову комунікацію.

Цифрові платформи, такі як *Materials Project*, *NOMAD Repository* та *Citrine Informatics*, забезпечують доступ до інформації та задають нові стандарти дослідницької практики в матеріалознавстві – від автоматизованого скринінгу до пояснюваного прогнозування властивостей. Їх упровадження сприяє переходу від інтуїтивного пошуку до системного, керованого даними проектування матеріалів, що особливо важливо в умовах глобальних викликів – енергетичних, екологічних і технологічних.

Крім цього, для повноцінного розкриття потенціалу таких платформ необхідно розв'язати низку методологічних і етичних проблем. Зокрема актуальним залишається питання інтерпретованості моделей, особливо в критичних галузях, зокрема й матеріалознавстві, де помилки можуть мати значні наслідки. Розвиток інтерпретованого ШІ, стандартизація метаданих, верифікація результатів та інтеграція з експериментальними лабораторіями – це ключові напрями, що мають бути підтримані на рівні міжнародної наукової політики.

У зв'язку з цим важливо забезпечити інклюзивність цифрової інфраструктури, щоб

доступ до потужних обчислювальних ресурсів, навчальних моделей і баз даних був відкритим для дослідників з різних регіонів світу, разом з тими, що працюють у складних економічних умовах. Такий підхід сприяє науковій справедливості й розширює спектр ідей, підходів і рішень, що формуються в глобальному науковому дискурсі.

Як наслідок, цифрові екосистеми матеріалознавства стають не просто інструментами, а інституційними середовищами, що формують нову етику досліджень, нову логіку відкриттів і нову модель наукової кооперації (рис. 3).



Рис. 3. Особливості цифрових екосистем матеріалознавства

У такому контексті розвиток матеріальної інформатики в Україні має як прикладне, так і стратегічне значення. У сучасних умовах, коли наука дедалі більше інтегрується в цифрові екосистеми, участь у глобальних платформах, зокрема *Materials Project*, *NOMAD Repository* та *Citrine Informatics*, відкриває доступ до передових методів моделювання, прогнозування й оптимізації матеріалів. Проте справжній науковий прорив можливий лише за умови двосторонньої інтеграції, тобто не лише споживання знань, але й долучення українських даних, моделей та експериментальних результатів у міжнародні репозиторії.

Постає необхідність створення локальних дата-центрів, які відповідатимуть міжнародним стандартам FAIR, підтримуватимуть

синхронізацію з глобальними системами та забезпечуватимуть обчислювальні ресурси для вітчизняних дослідників. Така інфраструктура може стати основою для формування національної програми з матеріальної інформатики, яка об'єднає академічні установи, галузеві інститути й промислових партнерів навколо спільних дослідницьких цілей.

Особливу роль у цьому процесі відіграє освітній компонент. Технічні університети України вже демонструють готовність до трансформації навчальних програм, упроваджуючи курси зі штучного інтелекту, машинного навчання, аналізу інформації та обчислювальної фізики. Наступним кроком має стати створення міждисциплінарних освітніх треків, які поєднуюватимуть фундаментальні знання з матеріалознавства із цифровими компетенціями, що відповідають вимогам сучасної науки та індустрії.

Для молодих дослідників відкриваються нові перспективи участі в міжнародних проєктах, отримання грантів (зокрема від *Horizon Europe*, *NATO Science for Peace and Security*, *National Science Foundation*) та стажування в провідних лабораторіях світу. Це не тільки сприяє професійному зростанню, але й формує нове покоління науковців, здатних працювати на перетині дисциплін і впроваджувати інновації в критично важливих секторах – енергетиці, оборонній промисловості, медицині, екології.

Водночас для сталого розвитку галузі необхідно підтримувати культуру відкритих даних, забезпечувати етичне використання алгоритмів ШІ та розвивати інтерпретовані моделі, що дають змогу пояснити логіку прогнозів і забезпечити довіру до результатів. Це сприятиме не лише науковій прозорості, але й зміцненню міжнародної репутації України як активного учасника глобального наукового простору.

Висновки

1. Описано сучасні цифрові платформи в матеріалознавстві, що інтегрують великі масиви даних, обчислювальні моделі та алгоритми штучного інтелекту.

2. Показано, що саме сучасні цифрові матеріалознавчі платформи формують основу нової дослідницької парадигми – матеріальної інформатики, у межах якої методи машинного навчання, активного навчання й глибинного аналізу даних відіграють ключову роль у прискоренні відкриття, оптимізації та прогнозуванні властивостей нових матеріалів.

3. Запропоновано ключові приклади використання відкритих (*Materials Project*, *NOMAD Repository*) і комерційних (*Citrine Informatics*) рішень для віртуального скринінгу, моделювання властивостей і оптимізації складу матеріалів.

4. Показано, що віртуальні експерименти й методи активного навчання дають змогу суттєво скоротити витрати на фізичні дослідження, підвищити точність прогнозів і прискорити інноваційний цикл у матеріалознавстві.

5. Окреслено основні виклики, пов'язані з інтерпретованістю моделей у матеріалознавстві, якістю даних, етичними аспектами й нерівністю доступу до обчислювальних ресурсів.

6. Обґрунтовано, що для України відкриваються нові можливості в галузі матеріальної інформатики завдяки доступу до глобальних платформ, участі в міжнародних програмах і розвитку міждисциплінарної освіти.

Література

1. Jain A., Ong S. P., Hautier G. et al. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials*. 2013. Vol. 1. No. 1. P. 011002. DOI: 10.1063/1.4812323.
2. Butler K. T., Davies D. W., Cartwright, H. et al. Machine learning for molecular and materials science. *Nature* 2018. Vol. 559. P. 547–555. DOI: 10.1038/s41586-018-0337-2.
3. Draxl C., Scheffler M. NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science. *MRS Bulletin*. 2019. Vol. 44. No. 7. P. 570–576. DOI: 10.1557/mrs.2019.161.
4. Scheidgen M., Draxler C., Ghiringhelli L. M. NOMAD Oasis: A federated infrastructure for FAIR materials data. *Journal of Open Source Software*. 2023. Vol. 8. No. 84. P. 5123. DOI: 10.21105/joss.05388.
5. Citrine Informatics. The Materials Data Facility: Data Services to Advance Materials Science Research. *JOM*. 2024. Vol. 68. No. 8. P. 2045–2052. DOI: 10.1007/s11837-024-06731-y.
6. Kalidindi S. R., De Graef M. Materials data science: Current status and future outlook. *Annual Review of Materials Research*. 2015. Vol. 45. P. 171–193. DOI: 10.1146/annurev-matsci-070214-020844.
7. FAIRmat Consortium. Building a FAIR data infrastructure for materials science in Europe. *Nature Computational Materials*. 2025. Vol. 11. P. 112–118. DOI: 10.1038/s41524-025-00512-7.
8. Alghadeer M., Aisyah N. D., Hezam M. et al. Machine learning prediction of materials properties from chemical composition: Status and prospects. *Chemical Physics Reviews*. 2024. Vol. 5. No. 4. P. 041313. DOI: 10.1063/5.0235541.

9. Aulin V., Kovalov S., Hryniv A. et al. Enhancing Tribological System Performance through Intelligent Data Analysis and Predictive Modeling: A Review. *Problems of Tribology*, 2025. Vol. 30, No. 3(117). P. 49–61, DOI: 10.31891/2079-1372-2025-117-3-49-61.
10. Berladir K., Antosz K., Ivanov V., Mitalova Z. Machine Learning-Driven Prediction of Composite Materials Properties Based on Experimental Testing Data. *Polymers*. 2025. Vol. 17. No. 5. P. 694. DOI: 10.3390/polym17050694.
11. Nematov D., Hojamberdiev M. Machine learning-driven materials discovery: Unlocking next-generation functional materials – A review. *Computational Condensed Matter*. 2025. Vol. 45. P. e01139. DOI: 10.1016/j.cocom.2025.e01139.
12. Aulin V., Hryniv A., Lysenko S., et al. Studying Truck Transmission Oils Using the Method of Thermal-Oxidative Stability During Vehicle Operation. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2019. Vol. 1 (6). P. 6–12. DOI: 10.15587/1729-4061.2019.156150.
13. Choudhary K., DeCost B. Atomistic Line Graph Neural Network for improved materials property predictions *npj Computational Materials*. 2021. Vol. 7. P. 185. DOI: 10.1038/s41524-021-00650-1.
14. Qi J., Hoyos D. I., Poon S. J. Machine Learning-Based Classification, Interpretation, and Prediction of High-Entropy-Alloy Intermetallic Phases *High Entropy Alloys & Materials*. 2023. Vol. 1. P. 312–326. DOI: 10.1007/s44210-023-00017-9.
15. Mahmoud E. M., Sayed M., Mansour T. S. et al. Biodegradable ceramic materials for orthopedic and dentistry applications *Discover Applied Sciences*. 2025. Vol. 7. P. 990. DOI: 10.1007/s42452-025-07618-6.
16. Xie T., Grossman J. C. Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an Accurate and Interpretable Prediction of Material Properties *Physical Review Letters*. 2021. Vol. 124, No. 14. P. 145501. DOI: 10.1103/PhysRevLett. 124. 145501.
17. Raccuglia P., Elbert K. C., Adler P. D. F. et al. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments. *Nature*. 2016. Vol. 533. No. 7601. P. 73–76. DOI: 10.1038/nature17439.
18. Jiang X., Wang W., Tian S. et al. Applications of natural language processing and large language models in materials discovery. *npj Computational Materials*. 2025. Vol. 11. P. 79. DOI: 10.1038/s41524-025-01554-0.
19. Bajan C., Lambard G. Exploring the expertise of large language models in materials science and metallurgical engineering. *Digital Discovery*. 2025. Vol. 4. P. 500–512. DOI: 10.1039/D4DD00319E.
20. A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier et al., “The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation”, *APL Mater.*, vol. 1, no. 1, p. 011002, 2013, doi: 10.1063/1.4812323.
21. K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright et al., “Machine learning for molecular and materials science”, *Nature*, vol. 559, pp. 547–555, 2018, doi: 10.1038/s41586-018-0337-2.
22. C. Draxl and M. Scheffler, “NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science”, *MRS Bull.*, vol. 44, no. 7, pp. 570–576, 2019, doi: 10.1557/mrs.2019.161.
23. M. Scheidgen, C. Draxler, and L. M. Ghiringhelli, “NOMAD Oasis: A federated infrastructure for FAIR materials data”, *J. Open Source Softw.*, vol. 8, no. 84, p. 5123, 2023, doi: 10.21105/joss. 05388.
24. Citrine Informatics, “The Materials Data Facility: Data Services to Advance Materials Science Research”, *JOM*, vol. 68, no. 8, pp. 2045–2052, 2024, doi: 10.1007/s11837-024-06731-y.
25. S. R. Kalidindi and M. De Graef, “Materials data science: Current status and future outlook”, *Annu. Rev. Mater. Res.*, vol. 45, pp. 171–193, 2015, doi: 10.1146/annurev-matsci-070214-020844.
26. FAIRmat Consortium, “Building a FAIR data infrastructure for materials science in Europe”, *Nat. Comput. Mater.*, vol. 11, pp. 112–118, 2025, doi: 10.1038/s41524-025-00512-7.
27. M. Alghadeer, N. D. Aisyah, M. Hezam et al., “Machine learning prediction of materials properties from chemical composition: Status and prospects”, *Chem. Phys. Rev.*, vol. 5, no. 4, p. 041313, 2024, doi: 10.1063/5.0235541.
28. V. Aulin, S. Kovalov, A. Hryniv, et al., “Enhancing Tribological System Performance through Intelligent Data Analysis and Predictive Modeling: A Review”. *Problems of Tribology*, vol. 30, no. 3/117, 2025, pp. 49–61, doi: 10.31891/2079-1372-2025-117-3-49-61.
29. K. Berladir, K. Antosz, V. Ivanov, and Z. Mitalova, “Machine learning-driven prediction of composite materials properties based on experimental testing data”, *Polymers*, vol. 17, no. 5, p. 694, 2025, doi: 10.3390/polym17050694.
30. D. Nematov and M. Hojamberdiev, “Machine learning-driven materials discovery: Unlocking next-generation functional materials – A review”, *Comput. Condens. Matter*, vol. 45, p. e01139, 2025, doi: 10.1016/j.cocom.2025.e01139.
31. Aulin V., Hryniv A., Lysenko S., et al. “Studying Truck Transmission Oils Using the Method of Thermal-Oxidative Stability During Vehicle Operation”, *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, vol. 1 (6), pp. 6–12, 2019, doi: 10.15587/1729-4061.2019.156150.
32. K. Choudhary and B. DeCost, “Atomistic line graph neural network for improved materials property predictions”, *npj Comput. Mater.*, vol. 7, p. 185, 2021, doi: 10.1038/s41524-021-00650-1.
33. J. Qi, D. I. Hoyos, and S. J. Poon, “Machine learning-based classification, interpretation, and prediction of high-entropy-alloy intermetallic phases”, *High Entropy Alloys Mater.*, vol. 1, pp. 312–326, 2023, doi: 10.1007/s44210-023-00017-9.

References

1. A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier et al., “The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation”, *APL Mater.*,

15. E. M. Mahmoud, M. Sayed, T. S. Mansour et al., “Biodegradable ceramic materials for orthopedic and dentistry applications”, *Discov. Appl. Sci.*, vol. 7, p. 990, 2025, doi: 10.1007/s42452-025-07618-6.
16. T. Xie and J. C. Grossman, “Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, no. 14, p. 145501, 2021, doi: 10.1103/PhysRevLett.124.145501.
17. P. Raccuglia, K. C. Elbert, P. D. F. Adler et al., “Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments”, *Nature*, vol. 533, no. 7601, pp. 73–76, 2016, doi: 10.1038/nature17439.
18. X. Jiang, W. Wang, S. Tian et al., “Applications of natural language processing and large language models in materials discovery”, *npj Comput. Mater.*, vol. 11, p. 79, 2025, doi: 10.1038/s41524-025-01554-0.
19. C. Bajan and G. Lambard, “Exploring the expertise of large language models in materials science and metallurgical engineering”, *Digit. Discov.*, vol. 4, pp. 500–512, 2025, doi: 10.1039/D4DD00139E.

Ковальов Юрій Григорович, канд. техн. наук, доц. кафедри матеріалознавства та ливарного виробництва, yukovalyov@ukr.net, тел. +38 099-560-17-14;

Аулін Віктор Васильович, д-р техн. наук, проф. кафедри експлуатації та ремонту машин, aulinvv@gmail.com, тел. +38 052 239-04-73;

Ковальов Сергій Григорович, канд. пед. наук, доц. кафедри вищої математики та фізики, kovalyovserggr@ukr.net, тел. +38 099-560-17-12;

Кузик Олександр Вікторович, канд. техн. наук, завідувач кафедри матеріалознавства та ливарного виробництва, kuzykov1985@gmail.com, тел. +38 052-239-04-88;

Гриньків Андрій Вікторович, канд. техн. наук, старший викладач кафедри експлуатації та ремонту машин, avgrinkiv@gmail.com, тел. +38 052-239-04-73.

Центральноукраїнський національний технічний університет, 25006, Україна, м. Кропивницький, пр. Університетський, 8.

Digitalization of Materials Science and Directions for the Application of Artificial Intelligence

Problem. The growing complexity of materials design, the expansion of high-dimensional compositional spaces, and the demand for sustainable innovation have exposed the limitations of traditional experimental approaches in materials science. These methods are often time-consuming, resource-intensive, and insufficiently scalable to meet the challenges of modern research and development. **Goal.**

The aim of this study is to identify current directions in the development of materials science under conditions of digital transformation, with a particular focus on the application of artificial intelligence (AI) methods to enhance scientific approaches, model material properties, and support sustainability principles. **Methodology.** The research involves a comparative analysis of leading digital platforms—Materials Project, NOMAD Repository, and Citrine Informatics—that integrate machine learning algorithms, simulation tools, and data management systems. Case studies from recent publications (2021–2025) are used to illustrate practical applications of AI in energy materials, polymers, and alloys. **Results.** Key areas of AI application in materials science have been identified, including virtual screening, active learning, interpretable modeling, and automated composition optimization. The study evaluates the prospects of digital transformation in the field, particularly in the context of Ukraine’s international integration and alignment with sustainable development goals. **Originality.** The paper substantiates the strategic role of materials informatics as a new research paradigm that combines AI, computational methods, and open science. It proposes approaches for integrating Ukrainian materials data into global platforms and outlines a roadmap for national infrastructure development. **Practical Value.** The findings can inform the creation of interdisciplinary educational programs, the development of a national materials informatics ecosystem, and the implementation of AI-driven innovation in critical sectors such as energy, medicine, defense, and environmental technologies.

Key words: artificial intelligence in materials science, Industry 4.0, sustainable development, digital materials modeling, intelligent data analysis.

Kovalov Yurii, Assoc. Prof., Ph.D., Department of Materials Science and Foundry Production, ORCID: 0000-0002-1729-2033, yukovalyov@ukr.net;

Aulin Viktor, Professor, Doct. of Science, Department of Materials Science and Foundry Production, ORCID: 0000-0003-2737-120X, aulinvv@gmail.com;

Kovalov Serhii, Ph.D., Department of Higher Mathematics and Physics, ORCID: 0009-0002-3922-8697, kovalyovserggr@ukr.net;

Kuzyk Oleksandr, Assoc. Prof., Ph.D., Department of Materials Science and Foundry Production, ORCID: 0000-0002-3047-3760, kuzykov1985@gmail.com;

Hryniv Andriy, Sr. Researcher, Ph.D., Department of Maintenance and Repair of Machines, ORCID: 0000-0002-4478-1940, avgrinkiv@gmail.com.

Central Ukrainian National Technical University, 8, Universytetskyi Ave., Kropyvnytskyi, 25006, Ukraine.