

УДК 004.8:620.1

[https://doi.org/10.32515/2664-262X.2025.12\(43\).2.134-142](https://doi.org/10.32515/2664-262X.2025.12(43).2.134-142)**Ю. Г. Ковальов**, доц., канд. тех. наук, **В. В. Аулін**, проф., д-р техн. наук,**С. Г. Ковальов**, канд. пед. наук, **О. В. Кузик**, доц., канд. техн. наук,**А. В. Гриньків**, ст. дослідник, канд. техн. наук*Центральноукраїнський національний технічний університет, м. Кропивницький, Україна**e-mail: yukovalyov@ukr.net, aulinvv@gmail.com*

Штучний інтелект у матеріалознавчих дослідженнях: тенденції, інструменти та трансформації

У цій роботі ми досліджуємо, як штучний інтелект змінює підходи до сучасного матеріалознавства. Зокрема, порівнюємо функціональні можливості трьох провідних цифрових платформ – Materials Project, NOMAD, Citrine Informatics. Нас цікавило, як ці ресурси реалізують моделювання властивостей матеріалів, автоматизований скринінг і оптимізацію складу. Ми також звернули увагу на принципи FAIR-даних і відкритої науки, які дедалі більше впливають на прозорість, відтворюваність і глобальну інтеграцію наукових результатів. Окремий акцент зроблено на цифрових екосистемах, особливості взаємодії в них та нових викликах, що пов'язані з екологічними та економічними чинниками. На прикладі згаданих платформ ми показуємо, як алгоритми машинного навчання допомагають долати ці бар'єри та відкривають нові можливості для цифрової трансформації галузі матеріалознавства.

матеріалознавство, методи штучного інтелекту, цифрові платформи, Materials Project, NOMAD, Citrine Informatics, цифрові екосистеми

Постановка проблеми. Матеріалознавство сьогодні переживає глибоку трансформацію, не лише технологічну, а й концептуальну. Цифрові інструменти, що стрімко розвиваються, змінюють уявлення про роль матеріалів у сталому виробництві та науці загалом [1-3]. У центрі цих змін – інтеграція штучного інтелекту з новими підходами до дослідження: від ізольованих експериментів до комплексних систем, які поєднують великі масиви даних, цифрове моделювання, хмарні обчислення та алгоритми машинного навчання [4-5]. В умовах Індустрії 4.0 змінюється не лише технічне оснащення лабораторій, а й самі принципи наукового пошуку. Дослідник працює з динамічними цифровими екосистемами, де дані, моделі та обчислення взаємодіють у реальному часі, відкриваючи нові горизонти для відкриттів.

Такий підхід відкриває нові горизонти для прогнозування властивостей матеріалів, оптимізації їхнього складу та структури, а також скорочення часу між науковою ідеєю та її практичною реалізацією [5-6]. У сучасному матеріалознавстві дедалі чіткіше простежується інтеграція фізичних процесів із цифровими моделями та аналітичними платформами. Галузь поступово набуває рис кіберфізичних систем [7-9]. Для України це не лише технологічний виклик, а й шанс посилити наукову спроможність, інтегруватися в міжнародні дослідницькі мережі та сприяти розвитку інноваційної економіки [9-10].

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Останні дослідження свідчать про динамічне зростання інтересу до використання штучного інтелекту в матеріалознавстві, особливо з 2018 року, що співпадає з активізацією глобальних процесів цифрової трансформації [1]. Наукові центри різних країн дедалі активніше застосовують алгоритми машинного навчання для прогнозування фізико-хімічних характеристик,

оптимізації складу та структури матеріалів, а також автоматизованого створення нових функціональних рішень [4, 6]. Значна частина таких досліджень орієнтована на розробку енергоощадних і екологічно безпечних матеріалів, що відповідає цілям сталого розвитку та принципам циркулярної економіки. Цифрове моделювання, хмарні обчислення та аналітика великих даних стали невід'ємними складовими сучасного інструментарію матеріалознавця. Ці зміни сприяють міждисциплінарній взаємодії, пришвидшують інноваційні процеси та формують основу для кіберфізичних дослідницьких систем [5, 7].

Постановка завдання. Метою даного дослідження є окреслення актуальних тенденцій у розвитку матеріалознавства в умовах цифрової трансформації, з акцентом на використанні штучного інтелекту для вдосконалення наукових методів, моделювання властивостей матеріалів і підтримки засад сталого розвитку. Для досягнення цієї мети визначено низку дослідницьких завдань, зокрема аналіз основних напрямів впровадження інтелектуальних технологій у матеріалознавчу практику та оцінка потенціалу цифрових рішень у контексті міжнародної інтеграції України та переходу до сталих виробничих моделей.

Виклад основного матеріалу. Аналіз сучасної наукової літератури свідчить про зміну фундаментальних принципів дослідницької діяльності в матеріалознавстві. Замість класичної схеми «гіпотеза → експеримент → аналіз» дедалі частіше застосовуються інтерактивні моделі, де цифрове моделювання, обробка даних і віртуальний скринінг відіграють роль початкових етапів дослідження [7]. Відкриті екосистеми знань дедалі активніше впливають на розвиток сучасної науки. Це динамічні середовища, які поєднують структуровані бази даних, алгоритмічні рішення та аналітичні платформи, створюючи умови для прозорого, колективного й міждисциплінарного дослідження.

Водночас цифрові інструменти не замінюють дослідника. Їхнє призначення – розширювати його можливості: працювати з великими обсягами даних, моделювати складні процеси та виявляти закономірності, що раніше залишалися поза межами традиційного аналізу. Створення нових матеріалів потребує поєднання глибокої предметної компетентності з сучасними засобами аналізу. У цьому контексті методи машинного та глибинного навчання відіграють ключову роль у формуванні нової дослідницької парадигми, орієнтованої на швидке, цілеспрямоване та ресурсоефективне проектування матеріалів.

Цифрова трансформація матеріалознавства супроводжується активним впровадженням інтелектуальних алгоритмів, які змінюють логіку досліджень – від ручного експериментування до автоматизованого аналізу та прогнозування [11-13]. Нижче подано класифікацію основних методів ШІ, що використовуються в галузі, відповідно до підходів, типів алгоритмів чи методології (рис. 1), з коротким поясненням їх ролі та прикладів застосування:

1. Кластеризація та зменшення розмірності. У роботі з багатовимірними даними часто виникає потреба у їхньому спрощенні для подальшого аналізу. Для візуалізації багатовимірних даних та виявлення прихованих структур застосовуються методи зменшення розмірності, зокрема аналіз головних компонент (PCA), алгоритм локального вкладення даних (t-SNE), та алгоритм компактного багатовимірного проектування (UMAP).

2. Машинне навчання (ML). Алгоритми машинного навчання дедалі частіше використовуються для виявлення закономірностей між структурними характеристиками матеріалів і їхніми властивостями. Такий підхід дає змогу не лише описувати вже відомі зв'язки, а й прогнозувати поведінку нових сполук на основі

наявних даних. Методи, такі як: дерева рішень (Decision Trees), метод опорних векторів (SVM) чи ансамблеві моделі (Random Forest), застосовуються для класифікації матеріалів, оцінки їхньої стабільності або прогнозу теплопровідності, електропровідності, твердості, фазових переходів тощо. Основними функціями цього класу є прогноз властивостей, класифікація та регресійний аналіз [14].

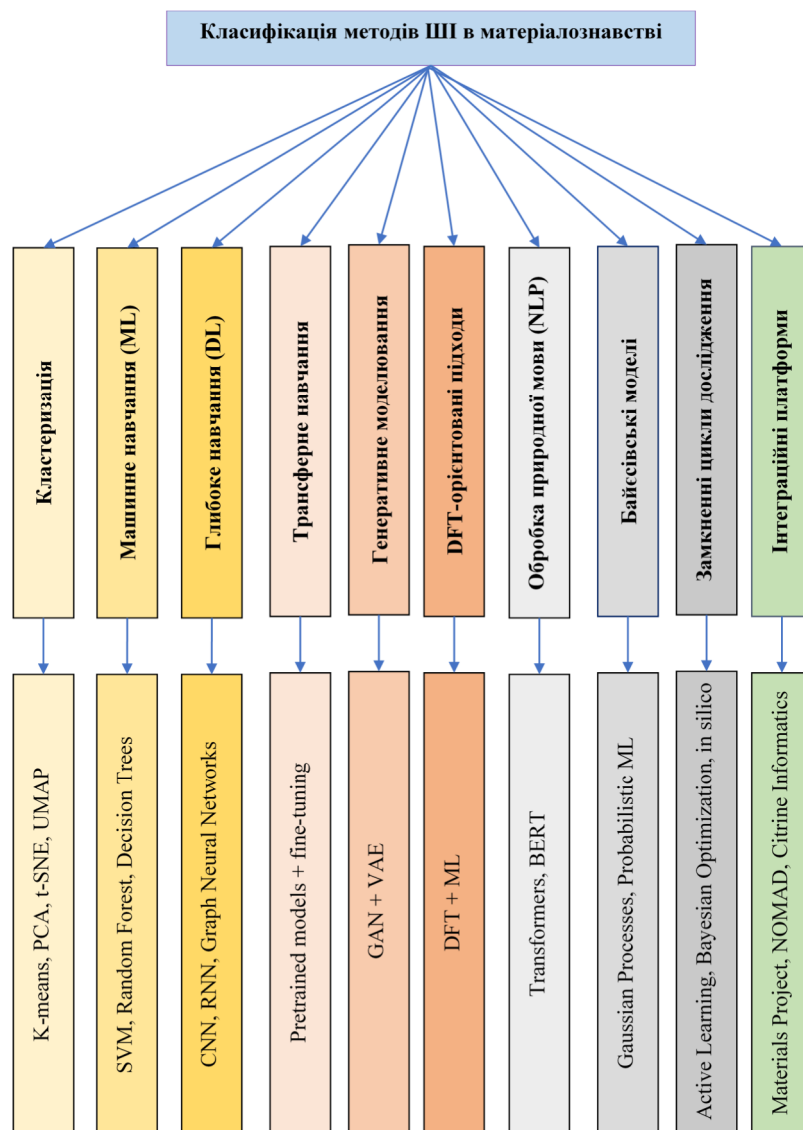


Рисунок 1 – Класифікація методів ШІ в матеріалознавстві

Джерело: розроблено на основі [3-7]

3. Глибинне навчання (DL). Згорткові (CNN), рекурентні (RNN) чи графові нейронні мережі (Graph Neural Networks) здатні обробляти складні дані, зокрема зображення мікроструктур або спектри. Вони використовуються для виявлення складних патернів, обробки зображень, структур для аналізу SEM-знімків, виявлення дефектів та генерації нових структур.

4. Трансферне навчання. У сфері машинного навчання дедалі більше уваги привертає підхід, який дозволяє переносити накопичені знання з однієї задачі на іншу. Це особливо корисно, коли обсяг доступних даних обмежений, але є можливість скористатися вже навченою моделлю. Наприклад, алгоритм, розроблений на основі

даних про металічні сплави, може бути переорієнтований на аналіз властивостей керамічних матеріалів або інших типів речовин.

5. Генеративне моделювання. Одним із актуальних напрямів цифрового матеріалознавства є застосування генеративних алгоритмів, зокрема варіаційних автоенкодерів (VAE) та генеративних змагальних мереж (GAN). Ці моделі здатні створювати штучні зображення мікроструктур, моделювати їхню еволюцію під дією зовнішніх факторів і прогнозувати, як зміни в хімічному складі впливають на функціональні властивості матеріалів. Зокрема, GAN-архітектури вже використовуються для синтезу візуальних представлень наноструктурованих поверхонь, що відкриває можливість віртуального скринінгу нових композицій без проведення фізичних експериментів.

6. DFT-орієнтовані підходи. Поєднання методів машинного навчання з фізичними моделями, зокрема з теорією функціоналу електронної густини (DFT), дає змогу підвищити точність прогнозування властивостей матеріалів. Такий підхід дозволяє з одного боку враховувати фундаментальні закономірності електронної структури, а з іншого – зберігати ефективність при розрахунках.

7. Обробка природної мови (NLP). Інструменти на основі трансформерів (наприклад, BERT) використовуються для аналізу наукових текстів, витягу знань із публікацій та побудови онтологій матеріалознавства [15].

8. Байєсівські моделі. Ці алгоритми дозволяють враховувати невизначеність у даних та прогнозах. Вони корисні для оптимізації складу матеріалів, коли важливо оцінити ризики та варіативність результатів [12].

9. Замкнені цикли досліджень. Це підходи, що передбачають автоматичне оновлення моделей на основі нових експериментальних або симуляційних даних. Вони реалізуються через активне навчання, байєсівську оптимізацію та роботизовані лабораторії. Використання *in silico*-методів стало ключовим елементом сучасного матеріалознавства, забезпечуючи високу масштабованість, оперативність та орієнтацію досліджень на конкретні цілі.

10. Інтеграційні платформи. Системи, подібні до Materials Project, NOMAD, Citrine Informatics, AFLOW, OQMD та інші [16] об'єднують бази даних, алгоритми та інтерфейси для дослідників. Вони забезпечують доступ до структурованої інформації, інструментів аналізу та API для автоматизації досліджень.

Синергія віртуального моделювання, глибинного навчання, обробки природної мови та квантових обчислень закладає основу нової дослідницької парадигми, з акцентом на швидке, адаптивне та економне створення матеріалів із заданими властивостями. Сучасні цифрові платформи, поєднуючи в собі структуровані бази даних, інструменти симуляції та алгоритми штучного інтелекту, формують сучасну інфраструктуру матеріалознавчих досліджень [7]. Ці технології не замінюють науковця, а розширюють його аналітичні можливості, підвищують точність прогнозів і забезпечують конкурентні переваги в умовах глобалізованої наукової екосистеми.

У процесі цифрової трансформації матеріалознавства важливу роль відіграють як відкриті, так і комерційні цифрові платформи, що забезпечують доступ до масштабних масивів структурованих даних, інструментів моделювання та засобів взаємодії з алгоритмами штучного інтелекту (табл. 1).

Однією з найвідоміших у цій галузі є платформа Materials Project. Вона функціонує як відкритий репозиторій матеріалознавчих даних, що охоплює понад 200 тисяч неорганічних сполук, для яких за допомогою методів DFT обчислено широкий спектр властивостей – від електронних і механічних до магнітних і термодинамічних.

Materials Project надає дослідникам потужний набір інструментів для моделювання кристалічних структур, побудови фазових діаграм, аналізу стабільності фаз, оцінки електропровідності та прогнозування енергетичних характеристик хімічних реакцій. Зручний інтерфейс дозволяє здійснювати пошук за різними критеріями: хімічним складом, симетрією, енергетичними параметрами тощо, що значно полегшує орієнтацію в багатовимірному просторі матеріалів.

Таблиця 1 – Порівняння основних матеріалознавчих цифрових платформ

Характеристика	Materials Project	NOMAD (Novel Materials Discovery)	Citrine Informatics
Тип платформи	Відкрита база даних і API	Європейська обчислювальна екосистема	Комерційна AI-платформа для R&D
Джерело даних	DFT-розрахунки, експерименти	Власні DFT-розрахунки, сторонні бази	Внутрішні дані компаній, лабораторні дані
Обсяг даних	більше 200 тис. матеріалів	більше 50 млн DFT-записів	Залежить від клієнта, приватні набори
Алгоритмічні можливості	ML-моделі, API для прогнозу	Візуалізація, порівняння, онтології	Вбудовані AI-моделі, трансферне навчання
Інтерфейс користувача	Веб-портал + API	Веб-інтерфейс + NOMAD Encyclopedia	Інтуїтивний UI + корпоративна інтеграція
Фокус на дослідника	Академічні дослідження, open science	Європейські консорціуми, HPC-доступ	Промислові R&D-команди
Можливості скринінгу	Віртуальний скринінг, фільтри	Пошук за властивостями, структурою	AI-дизайн матеріалів, оптимізація процесів
Моделі ШІ	ML-рекомендації, Crystal Graph	Підтримка ML через NOMAD AI Toolkit	Власні AI-моделі, Bayesian Optimization
Доступність	Безкоштовно, відкритий код	Безкоштовно	Платна, корпоративна ліцензія

Джерело: розроблено на основі [4, 6, 7]

Особливої уваги заслуговує можливість інтеграції платформи з зовнішніми програмними рішеннями через API, що відкриває шлях до автоматизованого скринінгу, побудови моделей машинного навчання та реалізації замкнених дослідницьких циклів. Materials Project активно використовується як в академічному середовищі, так і в промислових розробках. Таким чином, платформа виконує не лише роль джерела структурованих даних, а й слугує стратегічним інструментом, який поєднує в собі теоретичне моделювання, алгоритми штучного інтелекту та експериментальну перевірку в межах єдиного цифрового середовища.

У рамках європейських програм цифрової трансформації матеріалознавства особливе значення має платформа NOMAD Repository (Novel Materials Discovery), яка орієнтована на створення відкритої, стандартизованої та масштабованої інфраструктури для збереження, обміну й повторного використання наукових даних [4, 7]. Її архітектура базується на принципах FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable), що гарантують прозорість, доступність і довготривалу наукову цінність інформації [4].

Платформа NOMAD об'єднує дані з різних джерел, від квантово-хімічних розрахунків до експериментальних результатів, і трансформує їх у єдиний формат із розширеними метаданими. Це дозволяє здійснювати гнучкий пошук, фільтрацію та

порівняння між різними наборами. Система підтримує широкий спектр симуляційних кодів, зокрема VASP, Quantum ESPRESSO, GPAW, ABINIT, та забезпечує автоматичне вилучення структурних, енергетичних і термодинамічних характеристик [4, 7].

Однією з ключових функцій NOMAD є можливість локального розгортання через систему NOMAD Oasis, яка дозволяє дослідницьким групам створювати власні архіви, інтегрувати внутрішні джерела даних і запускати аналітичні інструменти у власному середовищі [7]. Такий підхід забезпечує високий рівень автономності при збереженні сумісності з глобальним репозиторієм. Платформа також підтримує програмну інтеграцію через API, включаючи стандарти OPTIMADE та DCAT, що відкриває можливості для автоматизованого доступу до даних, їх використання в моделях машинного навчання та цифрових лабораторіях.

У сучасному прикладному матеріалознавстві, що активно трансформується під впливом цифрових технологій, особливе місце займають комерційні платформи, орієнтовані на вирішення завдань промислових досліджень і розробок. Однією з найпомітніших у цій категорії є екосистема Citrine Informatics, яка поєднує алгоритми машинного навчання, хімічну експертизу та інтерпретовану аналітику для прискореного створення нових матеріалів [6]. Заснована у 2013 році, платформа знайшла широке застосування в галузях полімерних матеріалів, сплавів, акумуляторних компонентів, покриттів і композитів.

Відмінною рисою Citrine є використання моделей машинного навчання, здатних не лише генерувати прогнози, а й пояснювати логіку отриманих результатів. Це особливо важливо для промислового застосування, оскільки дозволяє також роботу з обмеженими наборами даних, що зазвичай трапляється при експериментальних дослідженнях, обмежених часом чи ресурсом.

Платформа Citrine має відкриту архітектуру та надає повний контроль над даними, включає графічне середовище для інженерів та Python-клієнт для автоматизації робочих процесів. Це дозволяє в довгостроковій перспективі використовувати її в якості платформи для R&D-стратегії підприємства.

Інтеграція відкритих наукових платформ із комерційними цифровими рішеннями поступово формує складну багаторівневу екосистему. Вона здатна підтримувати як фундаментальні дослідження, так і прикладні інженерні розробки. Такий синтез технологій і підходів сприяє пришвидшенню інноваційних процесів у матеріалознавстві. Дослідники отримують доступ до структурованих баз даних, інструментів моделювання та засобів штучного інтелекту.

Становлення єдиного цифрового простору в галузі матеріалознавства не слід розглядати лише з позиції технічного оновлення інфраструктури, оскільки воно передбачає фундаментальніші зміни в самій науковій культурі. Дійсно, йдеться про переосмислення моделей співпраці, механізмів колективного управління знаннями та спільного прийняття рішень. У цьому контексті матеріальна інформатика виступає як міждисциплінарна наука, що поєднує елементи фізики конденсованих середовищ, хімії, комп'ютерних наук, машинного навчання та наукової комунікації.

Цифрові репозиторії, такі як Materials Project та NOMAD, платформи Citrine Informatics, OQMD, AFLOW та інші [15], задають нові орієнтири для дослідницької практики: від автоматизованого скринінгу матеріалів до обґрунтованого прогнозування основних властивостей. Можна констатувати, що під їх впливом відбувається перехід від інтуїтивного пошуку до системно-керованого проєктування матеріалів. Також змінюється основна парадигма

Разом з тим, повноцінне використання подібних платформ зіштовхується з рядом викликів, як методологічного так і етичного характеру. Зокрема, нова парадигма

співпраці потребує виконання великого обсягу колективної роботи різних фахівців, їх кооперацію, а також взаємодію з ШІ. Індивідуальні здобутки інтегруються в колективні знання, а отже питання інтелектуальної власності, якості, відкритості і верифікації всіх досліджень, а особливо експериментальних, які впливатимуть на загальний результат, потреба в дотриманні протоколів та стандартизації метаданих. Додатково виникають питання у інклюзії цифрової інфраструктури, оскільки колективні знання, що генеруються відкритою співпрацею наукової спільноти апріорі повинні забезпечуватися рівним доступом всіх дослідників до баз даних, обчислювальних ресурсів, навчальних моделей тощо. А це вже безумовно стратегічні виклики, які потребують вирішення на рівні міжнародної наукової політики.

Слід зазначити, що говорячи про цифрові екосистеми матеріалознавства можна вже сьогодні виділити основні риси взаємодії в ній. Це, зокрема, міждисциплінарна інтеграція, інтелектуальна взаємодія, кооперація через сценарії, глобальна інклюзивність, інституційна відкритість, відтворюваність і прозорість.

Сьогодні, коли цифрові технології дедалі більше впливають на всі аспекти наукових досліджень, матеріальна інформатика в Україні виходить на передній план як напрям особливого значення. Залучення до міжнародних ініціатив, що були розглянуті в статті, відкриває українським науковцям шлях до використання найновіших інструментів для моделювання та прогнозування властивостей матеріалів.

Проте важливо не лише користуватися цими платформами, а й повністю використовувати потенціал, що вони надають, тобто активно долучати власні напрацювання до цих баз. Це сприятиме повноцінному обміну інформацією та посиленню присутності української науки на світовій арені.

Для реалізації такого підходу необхідно створити національні дата-центри, що відповідатимуть принципам FAIR і зможуть ефективно взаємодіяти з міжнародними інфраструктурами. Саме така технічна база може стати фундаментом для всеукраїнської програми з розвитку матеріальної інформатики, яка об'єднає академічні установи, профільні інститути та представників промисловості.

Не менш важливою є й освітня складова. Уже сьогодні технічні виші впроваджують дисципліни, пов'язані з аналізом даних, машинним навчанням і комп'ютерним моделюванням. Наступним логічним кроком має стати запуск міждисциплінарних програм, що поєднуюватимуть знання з матеріалознавства з цифровими навичками, необхідними для роботи в нових умовах.

Висновки. Наостанок, хотілося б виділити деякі ключові аспекти, виходячи з поставленої нами мети. Цифрові технології, від штучного інтелекту до відкритих наукових платформ, дедалі активніше змінюють те, як ми досліджуємо матеріали. Сучасне матеріалознавство вже не уявити без симуляцій, алгоритмів прогнозування та доступу до глобальних баз даних. У нашій роботі ми зосередилися на ключових напрямках цієї трансформації, зокрема на тому, як цифрові екосистеми допомагають пришвидшити відкриття та вдосконалити моделювання.

Україна має всі передумови, щоб стати активним учасником світової наукової спільноти. Але для цього недостатньо просто користуватися міжнародними платформами. Важливо також ділитися власними даними, моделями та результатами. Це означає, що нам потрібно розвивати національну інфраструктуру, яка відповідатиме міжнародним стандартам, і водночас оновлювати освітні програми, щоб поєднувати матеріалознавство з цифровими компетенціями.

У статті, на основі аналізу, ми виділяємо підходи, які можуть закласти базу нової дослідницької культури. Такий підхід не лише підвищує ефективність наукової роботи, а й сприятиме інтеграції українських дослідників в міжнародні наукові проєкти.

Список літератури

1. Butler K. T., Davies D. W., Cartwright H., Isayev O., Walsh A. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*. 2018. Vol. 559, № 7715. P. 547–555. DOI: 10.1038/s41586-018-0337-2.
2. Ward L., Liu R., Krishna A., Hegde V. I., Agrawal A., Choudhary A., Wolverton C. Including crystal structure attributes in machine learning models of formation energies via Voronoi tessellations. *Physical Review B*. 2017. Vol. 96, № 2. Article 024104. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.024104.
3. Schmidt J., Marques M. R. G., Botti S., Marques M. A. L. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *npj Computational Materials*. 2019. Vol. 5, № 1. Article 83. DOI: 10.1038/s41524-019-0221-0.
4. Draxl C., Scheffler M. NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science. *MRS Bulletin*. 2019. Vol. 44, № 7. P. 570–576. DOI: 10.48550/arXiv.1805.05039.
5. Agrawal A., Choudhary A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Materials*. 2016. Vol. 4, № 5. Article 053208. DOI: 10.1063/1.4946894.
6. Citrine Informatics. AI-powered materials development platform: веб-сайт. URL: <https://citrine.io/> (дата звернення: 12.10.2025)
7. Nematov D., Hojamberdiev M. Machine learning-driven materials discovery: Unlocking next-generation functional materials – A review. *Comput. Condens. Matter*. 2025. Vol. 45. Article e01139. DOI: 10.1016/j.cocom.2025.e01139.
8. Aulin V. V., Kovalov S. H., Hrynkiv A. V., Kovalov Yu. G., Holovaty A. O., Kuzik O. V., Slon V. V. Enhancing Tribological System Performance through Intelligent Data Analysis and Predictive Modeling: A Review. *Problems of Tribology*. 2025. Vol. 30, № 3(117). P. 49–61. DOI: 10.31891/2079-1372-2025-117-3-49-61.
9. Аулін В. В., Гриньків А. В., Головатий А. О. Кіберфізичний підхід при створенні, функціонуванні та удосконаленні транспортновиробничих систем. *Центральноукраїнський науковий вісник. Технічні науки*. 2020. № 3(34). С. 331–343. DOI: 10.32515/2664-262X.2020.3(34).331-343.
10. Aulin V., Hrynkiv A., Lysenko S., Rohovskii I., Chernovol M., Lyashuk O., Zamota T. 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.
11. Xie T., Grossman J. C. Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 120, № 14. Article 145301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.145301.
12. Talapatra A., Boluki S., Duong T., Qian X., Dougherty E., Arroyave R. Autonomous efficient experiment design for materials discovery with Bayesian model averaging. *Phys. Rev. Materials*. 2018. Vol. 2. Article 113803. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.2.113803.
13. Ren F., Ward L., Williams T., Laws K. J., Wolverton C., Hattrick-Simpers J., Mehta A. Accelerated discovery of metallic glasses through iteration of machine learning and high-throughput experiments. *Science Advances*. 2018. Vol. 4, № 4. Article eaq1566. DOI: 10.1126/sciadv.aq1566.
14. Chen C., Ye W., Zuo Y., Zheng C., Ong S. P. Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals. *Nature Communications*. 2020. Vol. 10, № 1. Article 357. DOI: 10.1038/s41467-020-19964-7.
15. Tshitoyan V., Dagdelen J., Weston L., Dunn A., Rong Z., Kononova O., Persson K. A., Ceder G., Jain A. Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature. *Nature*. 2019. Vol. 571, № 7763. P. 95–98. DOI: 10.1038/s41586-019-1335-8.
16. Kalidindi S. R. 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.

References

1. Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 559(7715), 547–555. doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2.
2. Ward, L., Liu, R., Krishna, A., Hegde, V. I., Agrawal, A., Choudhary, A., & Wolverton, C. (2017). Including crystal structure attributes in machine learning models of formation energies via Voronoi tessellations. *Physical Review B*, 96(2), 024104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.024104>.
3. Schmidt, J., Marques, M. R. G., Botti, S., & Marques, M. A. L. (2019). Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *npj Computational Materials*, 5(1), 83. <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0>.
4. Draxl, C., & Scheffler, M. (2019). NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science. *MRS Bulletin*, 44(7), 570–576. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1805.05039>.
5. Agrawal, A., & Choudhary, A. (2016). Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Materials*, 4(5), 053208. doi.org/10.1063/1.4946894.
6. Citrine Informatics. (2025). AI-powered materials development platform. Retrieved from <https://citrine.io/>.

7. Nematov, D. & Hojamberdiev, M. (2025). Machine learning-driven materials discovery: Unlocking next-generation functional materials – A review. *Comput. Condens. Matter*, 45, e01139. doi.org/10.1016/j.cocom.2025.e01139.
8. Aulin, V. V., Kovalov, S. H., Hryn'kiv, A. V., Kovalov, Yu. G., Holovaty, A. O., Kuzik, O. V., & Slon, V. V. (2025) Enhancing Tribological System Performance through Intelligent Data Analysis and Predictive Modeling: A Review. *Problems of Tribology*, 30(3/117), 49–61. <https://doi.org/10.31891/2079-1372-2025-117-3-49-61>.
9. Aulin, V. V., Hryn'kiv, A. V., & Holovaty, A. O. (2020). Kiberfizychnyy pidkhdid do stvorennnya, funktsionuvannya ta vdoskonalennya transportnykh ta vyrobnychkykh system [Cyber-physical approach to the creation, functioning and improvement of transport-production systems]. *Tsentrlnoukrainskyi naukovyi visnyk. Tekhnichni nauky*, (3)34, 331–343. doi.org/10.32515/2664-262X.2020.3(34).331-343 [in Ukrainian].
10. Aulin, V., Hryn'kiv, A., Lysenko, S., Rohovskii, I., Chernovol, M., Lyashuk, O., & Zamota, T. (2019). Studying Truck Transmission Oils Using the Method of Thermal-Oxidative Stability During Vehicle Operation. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 1(6), 6–12. doi.org/10.15587/1729-4061.2019.156150.
11. Xie, T., & Grossman, J. C. (2018). Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. *Physical Review Letters*, 120(14), 145301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145301>.
12. Talapatra, A., Boluki, S., Duong, T., Qian, X., Dougherty, E., & Arroyave, R. (2018). Autonomous efficient experiment design for materials discovery with Bayesian model averaging. *Phys. Rev. Materials* 2, 113803. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.113803>.
13. Ren, F., Ward, L., Williams, T., Laws, K. J., Wolverson, C., Hattrick-Simpers, J., & Mehta, A. (2018). Accelerated discovery of metallic glasses through iteration of machine learning and high-throughput experiments. *Science Advances*, 4(4), eaq1566. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aq1566>.
14. Chen, C., Ye, W., Zuo, Y., Zheng, C., & Ong, S. P. (2020). Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals. *Nature Communications*, 10(1), 357. doi.org/10.1038/s41467-020-19964-7.
15. Tshitoyan, V., Dagdelen, J., Weston, L., Dunn, A., Rong, Z., Kononova, O., Persson, K. A., Ceder, G., & Jain, A. (2019). Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature. *Nature*, 571(7763), 95–98. <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1335-8>.
16. Kalidindi, S. R. (2015). Materials data science: Current status and future outlook. *Annual Review of Materials Research*, 45, 171–193. <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070214-020844>.

Yurii Kovalov, Assoc. Prof., PhD tech. sci., **Viktor Aulin**, Prof., Dr. tech. sci., **Serhii Kovalov**, PhD ped. sci., **Oleksandr Kuzyk**, Assoc. Prof., PhD tech. sci., **Andrii Hryn'kiv**, Sr. Researcher, PhD tech. sci.
Central Ukrainian National Technical University, Kropyvnytskyi, Ukraine

Artificial Intelligence in Materials Research: Trends, Tools, and Transformations

This paper examines the evolving role of digital platforms in reshaping materials science through the lens of materials informatics. It focuses on three prominent initiatives—Materials Project, NOMAD Repository, and Citrine Informatics—that illustrate how artificial intelligence, computational modeling, and structured data infrastructures are converging to accelerate discovery and innovation. Each platform integrates machine learning algorithms, simulation tools, and data management systems to support tasks such as high-throughput screening, property prediction, and compositional optimization.

The study provides a comparative analysis of the functional architecture of these platforms, identifying core components that could inform the development of a national ecosystem for materials informatics. Particular attention is given to the principles of FAIR data (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable), which underpin transparency, reproducibility, and collaborative research across borders. By examining how these platforms operationalize FAIR principles, the paper highlights pathways for aligning Ukrainian research infrastructure with international standards.

Traditional experimental approaches, while foundational, often face limitations in terms of scalability, cost, and time. The integration of AI-driven methods offers a promising alternative, enabling researchers to simulate, predict, and refine materials with greater efficiency. This shift calls for strategic investment not only in technical infrastructure but also in education. The paper proposes the development of interdisciplinary academic programs that combine materials science with data analytics, computational physics, and AI literacy.

Furthermore, the research outlines strategic directions for incorporating Ukrainian materials data into global platforms, emphasizing the importance of two-way knowledge exchange. Such integration would enhance the visibility of Ukrainian research and foster deeper international collaboration. The insights presented here aim to support both academic inquiry and policy development, offering a foundation for future initiatives in sustainable innovation and digital transformation within the materials science domain.

materials science, artificial intelligence methods, digital platforms, Materials Project, NOMAD, Citrine Informatics, digital ecosystems

Одержано (Received) 05.11.2025

*Прорецензовано (Reviewed) 11.11.2025
Прийнято до друку (Approved) 25.11.2025*