

Центральноукраїнський національний технічний університет  
Механіко-технологічний факультет  
Кафедра Матеріалознавства та ливарного виробництва

«Допущено до захисту»  
Завідувач кафедри М та ЛВ  
канд. техн. наук, доцент  
\_\_\_\_\_ Олександр КУЗИК  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2026 р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**  
за першим (бакалаврським) рівнем вищої освіти на тему:  
**«Прогнозування модуля Юнга полімерних  
нанокомпозитів, армованих графеном, за допомогою  
моделей машинного навчання»**

Виконав здобувач вищої освіти 4-го курсу,  
групи МЗ-23мб  
ОПП «Прикладне матеріалознавство та  
інжиніринг»  
спеціальності 132 «Матеріалознавство»  
\_\_\_\_\_ Андрій ПРИСЯЖНИЙ

Керівник роботи канд. техн. наук, доцент  
\_\_\_\_\_ Юрій КОВАЛЬОВ  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Рецензент:

\_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Центральноукраїнський національний технічний університет  
 Факультет \_\_\_\_\_ Механіко-технологічний  
 Кафедра \_\_\_\_\_ Матеріалознавства та ливарного виробництва  
 Рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ перший (бакалаврський)  
 Галузь знань \_\_\_\_\_ 13 Механічна інженерія  
 Спеціальність \_\_\_\_\_ 132 Матеріалознавство  
 Освітньо-професійна  
 програма \_\_\_\_\_ Прикладне матеріалознавство та інжиніринг

ЗАТВЕРДЖУЮ  
 Завідувач кафедри М та ЛВ  
 \_\_\_\_\_ Олександр КУЗИК  
 « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ р.

ЗАВДАННЯ НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ  
 ЗА ПЕРШИМ (БАКАЛАВРСЬКИМ) РІВНЕМ ВИЩОЇ ОСВІТИ  
 ЗДОБУВАЧА ВИЩОЇ ОСВІТИ

***Присяжного Андрія Олексійовича***

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи: Прогнозування модуля Юнга полімерних нанокомпозитів, армованих графеном, за допомогою моделей машинного навчання
  2. Керівник роботи: кандидат технічних наук, доцент Юрій Григорович Ковальов
  3. Строк подання роботи до захисту: \_\_\_\_ травня 2026 р.
  4. Мета та завдання випускної кваліфікаційної роботи: розробка та верифікація ансамблю моделей машинного навчання для прогнозування модуля Юнга (модуля пружності) полімерних нанокомпозитів, армованих графеном, на основі параметрів системи та умов синтезу.
- Завдання:
1. Сформувати базу даних із верифікованих наукових публікацій із охопленням різних форм графенового наповнювача та методів виготовлення.
  2. Провести статистичний аналіз: розподіли, кореляції, виявлення аномалій та оцінка впливу окремих параметрів на цільову змінну.
  3. Реалізувати та налаштувати чотири алгоритми машинного навчання різної складності.
  4. Виконати порівняльний аналіз точності моделей за метриками MAE, RMSE та  $R^2$  і зіставити результати з аналітичною моделлю Халпіна-Цая.
  5. Провести аналіз важливості ознак і сформулювати практичні рекомендації для проектування складів нанокомпозитів.

## 5. Консультанти по роботі, із зазначенням розділів

Розділ	Консультант	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв
Вступ	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 1. Огляд літературних даних	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 2. Розробка методології дослідження	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 3. Розробка моделей прогнозування	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 4. Аналіз результатів	Ковальов Ю.Г.		

## КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів роботи	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1.	Патентний огляд		
2.	Огляд літератури та збір даних		
3.	Формування бази даних, EDA		
4.	Розробка та навчання моделей МН		
5.	Оформлення пояснювальної записки		
6.	Оформлення презентації		
7.	Здача роботи, перевірка на запозичення		

Дата видачі завдання « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Керівник роботи \_\_\_\_\_ Юрій КОВАЛЬОВ

(підпис)

Завдання прийнято до виконання « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Здобувач вищої освіти

\_\_\_\_\_ Андрій ПРИСЯЖНИЙ

(підпис)

Центральноукраїнський національний технічний університет  
Механіко-технологічний факультет  
Кафедра матеріалознавства та ливарного виробництва

***ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА***

*до кваліфікаційної роботи на тему:*

**Прогнозування модуля Юнга полімерних наноккомпозитів, армованих графеном, за допомогою моделей машинного навчання**

Виконав здобувач вищої освіти

4-го курсу, групи МЗ-23мб

ОПП «Прикладне матеріалознавство та інжиніринг»

спеціальності 132 «Матеріалознавство»

\_\_\_\_\_ Андрій ПРИСЯЖНИЙ

Керівник роботи:

канд. техн. наук, доцент

\_\_\_\_\_ Юрій КОВАЛЬОВ

Кропивницький 2026

## АНОТАЦІЯ

Відомості про обсяг роботи: пояснювальна записка містить 40 сторінок, 9 ілюстрацій, 4 таблиці. Список використаних джерел містить 34 найменування.

Об'єктом дослідження є механічна жорсткість полімерних нанокompозитних систем «полімерна матриця – графеновий наповнювач» залежно від вмісту, морфології та типу наповнювача, виду матриці і технологічних умов виготовлення.

Метою роботи є розробка та верифікація ансамблю моделей машинного навчання для прогнозування модуля Юнга (модуля пружності) полімерних нанокompозитів, армованих графеном, на основі параметрів системи та умов синтезу.

У ході дослідження сформовано базу даних із 111 записів, зібраних із 34 верифікованих наукових публікацій. База охоплює дев'ять типів полімерних матриць і три форми графенового наповнювача. Навчено і порівняно чотири алгоритми – Ridge-регресія, Random Forest, XGBoost та штучна нейронна мережа (MLP) – з оцінкою за метриками MAE, RMSE та  $R^2$  методом 5-кратної крос-валідації.

Встановлено, що алгоритм XGBoost забезпечує найвищу точність:  $R^2 = 0,954$ , MAE = 0,197 ГПа, RMSE = 0,289 ГПа. Аналіз важливості ознак виявив, що модуль матриці (56,3%) і температура склування (14,2%) є домінуючими предикторами, тоді як безпосередній вміст графену впливає нелінійно і є менш вагомим без урахування природи матриці. Порівняння з аналітичною моделлю Халпіна-Цая підтвердило принципову перевагу ML-підходу:  $R^2$  зростає від -0,617 до 0,954. Отримані результати можуть застосовуватися для прискореного проектування нових складів нанокompозитів.

НАНОКОМПОЗИТ, ГРАФЕН, МОДУЛЬ ЮНГА, XGBOOST, RANDOM FOREST, МАШИННЕ НАВЧАННЯ, ПОЛІМЕРНА МАТРИЦЯ, ВАЖЛИВІСТЬ ОЗНАК

## ABSTRACT

Scope of work: the bachelor's thesis contains 40 pages, 9 figures, and 4 tables. The reference list includes 34 items.

The object of study is the mechanical stiffness of "polymer matrix – graphene filler" nanocomposite systems depending on the filler loading, morphology, and type, as well as the matrix type and processing conditions. The aim of the work is to develop and verify an ensemble of machine learning models for predicting the Young's modulus of graphene-reinforced polymer nanocomposites based on system parameters and synthesis conditions. During the research, a database of 111 entries was compiled from 34 verified scientific publications. The database covers nine types of polymer matrices and three forms of graphene filler. Four algorithms – Ridge Regression, Random Forest, XGBoost, and Multilayer Perceptron (MLP) – were trained and compared using MAE, RMSE, and  $R^2$  metrics via 5-fold cross-validation. The results show that the XGBoost algorithm provides the highest accuracy:  $R^2 = 0.954$ , MAE = 0.197 GPa, and RMSE = 0.289 GPa. Feature importance analysis revealed that the matrix modulus (56.3%) and glass transition temperature (14.2%) are the dominant predictors, while the graphene loading has a non-linear effect and is less significant without considering the matrix type. Comparison with the Halpin-Tsai analytical model confirmed the fundamental advantage of the ML approach:  $R^2$  increased from -0.617 to 0.954. The findings can be applied to the accelerated design of new nanocomposite formulations.

NANOCOMPOSITE, GRAPHENE, YOUNG'S MODULUS, XGBOOST, RANDOM FOREST, MACHINE LEARNING, POLYMER MATRIX, FEATURE IMPORTANCE

**ЗМІСТ**

СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	9
ВСТУП	10
РОЗДІЛ 1 СТАН ПИТАННЯ ТА ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	12
1.1 Графен як наповнювач: будова, різновиди та ключові властивості	12
1.1.1 Кристалічна структура та класифікація графенових матеріалів	12
1.1.2 Механічні характеристики та чинники їх варіювання	14
1.2 Полімерні нанокомпозити	15
1.3 Аналітичні мікромеханічні моделі для прогнозування $E$	17
1.4 Машинне навчання у матеріалознавстві нанокомпозитів	18
РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ ТА ПІДГОТОВКА ДАНИХ	21
2.1 Джерела даних і формування вибірки	21
2.2 Опис вхідних параметрів і цільової змінної	21
2.3 Попередня обробка даних	23
2.4 Кореляційний аналіз	23
РОЗДІЛ 3 РОЗРОБКА ТА НАВЧАННЯ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗУВАННЯ	25
3.1 Вибір і опис алгоритмів машинного навчання	25
3.1.1 Метод Ridge-регресія	25
3.1.2 Random Forest	25
3.1.3 XGBoost	26
3.1.4 Штучна нейронна мережа	26
3.2 Навчання та оптимізація гіперпараметрів	27
3.3 Порівняльний аналіз точності моделей	27
РОЗДІЛ 4 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ІНТЕРПРЕТАЦІЯ МОДЕЛІ	30
4.1 Аналіз важливості ознак	30
4.3 Порівняння з аналітичною моделлю Халпіна-Цая	32

	8
4.4 Практичні рекомендації для проектування складів	33
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ	36
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	38

## СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

- EDA – розвідувальний аналіз даних (Exploratory Data Analysis);
- FLG – мало-шаровий графен (Few-Layer Graphene);
- GNP – нанопластинки графену (Graphene Nanoplatelet);
- GO – оксид графену (Graphene Oxide);
- MAE – середня абсолютна похибка (Mean Absolute Error), ГПа;
- MLP – багатошаровий перцептрон (Multilayer Perceptron);
- $R^2$  – коефіцієнт детермінації;
- rGO – відновлений оксид графену (reduced Graphene Oxide);
- RMSE – середньоквадратична похибка (Root Mean Squared Error), ГПа;
- XGBoost – метод екстремального градієнтного бустингу;
- $\alpha$  – аспектне співвідношення наповнювача ( $l/t$ );
- $E_c$  – модуль Юнга нанокompозиту, ГПа;
- $E_m$  – модуль Юнга чистої полімерної матриці, ГПа;
- $T_g$  – температура склування полімеру, °C;
- $w_t\%$  – об’ємна частка наповнювача;
- МН – машинне навчання;
- ШНМ – штучна нейронна мережа.

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Стрімкий розвиток високотехнологічних галузей промисловості формує зростаючий попит на матеріали, що поєднують низьку масу з високими показниками жорсткості та міцності. Полімерні нанокомпозити з графеновим наповнювачем відповідають цим вимогам і вже знайшли застосування в авіабудуванні, гнучкій електроніці та біомедичній інженерії. Попри значний масив накопичених експериментальних відомостей, предметна область має суттєву невирішену проблему: кількісний зв'язок між технологічними умовами виготовлення нанокомпозиту та його модулем пружності досі не піддається надійному опису. Існуючі аналітичні підходи, зокрема моделі Халпіна–Цая та Мори–Танаки, спираються на спрощені геометричні припущення й не враховують одночасного впливу якості диспергування, функціоналізації поверхні пластин та природи полімерної матриці, що призводить до систематичного розходження розрахункових і експериментальних значень.

Провідні дослідницькі групи світу: зокрема, Le і Nguyen, Kim та співавтори [15], демонструють, що залучення статистичних методів навчання дозволяє подолати обмеженість класичних мікромеханічних рівнянь. Напрямок цифрового матеріалознавства, що активно формується в університетах Європи, США та Азії, орієнтований на побудову даних-керованих моделей, здатних апроксимувати складні багатофакторні залежності без апріорного знання їхньої аналітичної форми.

Необхідність створення надійного обчислювального інструменту для прогнозування модуля Юнга графен-полімерних систем, придатного до практичного використання конструкторами нових матеріалів, визначає підставу для виконання цієї роботи.

**Метою роботи** є розробка та верифікація ансамблю моделей машинного навчання для прогнозування модуля Юнга полімерних нанокомпозитів, армованих графеном, на основі параметрів системи та умов синтезу.

Для досягнення мети поставлено такі **задачі**:

1. Сформувати базу даних із верифікованих наукових публікацій із охопленням різних форм графенового наповнювача та методів виготовлення.
2. Провести статистичний аналіз: розподіли, кореляції, виявлення аномалій та оцінка впливу окремих параметрів на цільову змінну.
3. Реалізувати та налаштувати чотири алгоритми машинного навчання різної складності.
4. Виконати порівняльний аналіз точності моделей за метриками MAE, RMSE та  $R^2$  і зіставити результати з аналітичною моделлю Халпіна-Цая.
5. Провести аналіз важливості ознак і сформулювати практичні рекомендації для проектування складів нанокompозитів.

**Галузь застосування:** авіакосмічна промисловість (легкі конструкційні елементи), гнучка електроніка та захисні покриття, медицина (тканинна інженерія та біосенсори), спортивний інвентар і автомобілебудування.

**Взаємозв'язок з іншими роботами.** Робота спирається на теоретичний фундамент мікромеханіки композитних матеріалів (моделі Халпіна–Цая та Мори–Танаки) і розвиває напрям застосування методів інтелектуального аналізу у задачах матеріалознавства. Дослідження виконувалося в межах ДіР (ДРН 0125U004330).

**Практичне значення отриманих результатів.** Розроблений програмний інструмент забезпечує прогнозування модуля Юнга нанокompозиту з коефіцієнтом детермінації  $R^2 = 0,954$ , що усуває потребу в повному циклі лабораторних випробувань на ранніх стадіях проектування. Впровадження такого підходу скорочує витрати на дефіцитні графенові наповнювачі, зменшує тривалість технологічного відпрацювання нових складів та надає інженеру можливість оперативно коригувати рецептуру матеріалу відповідно до заданих механічних вимог.

## РОЗДІЛ 1

### СТАН ПИТАННЯ ТА ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

#### 1.1 Графен як наповнювач: будова, різновиди та ключові властивості

##### 1.1.1 Кристалічна структура та класифікація графенових матеріалів

Графен являє собою моношар атомів вуглецю з  $sp^2$ -гібридизацією, впорядкованих у двовимірну гексагональну решітку. Міжатомна відстань у площині становить 0,142 нм, а між шарами у багатшарових структурах – близько 0,335 нм. Саме така геометрія забезпечує делокалізацію  $\pi$ -електронів уздовж усієї площини пластини, що є першопричиною виняткових фізичних характеристик матеріалу [28]. Відкриття ізольованого моношару у 2004 році стало відправною точкою для цілого напрямку досліджень у матеріалознавстві наноконструктивів.

На практиці для армування полімерів рідко використовують ідеальний монокристалічний графен – надто висока його вартість і складність масштабованого синтезу. Натомість промислово доступні різновиди поділяють на три основні класи. Нанопластинки графену (GNP) отримують механічним розшаруванням природного графіту; вони складаються з 5–15 атомних шарів і мають латеральний розмір від одиниць до сотень мікрометрів (рис. 1.1) [28].

Оксид графену (GO) синтезують хімічним окисненням за методом Хаммерса: кисневмісні функціональні групи (епоксидні, карбоксильні, гідроксильні) роблять поверхню гідрофільною, що суттєво полегшує диспергування у полярних матрицях, однак одночасно порушують  $sp^2$ -гібридизацію і знижують власний модуль пластини [25]. Відновлений оксид графену (rGO) отримують термічним або хімічним відновленням GO; ступінь відновлення визначає, наскільки вдається повернути механічні та електричні властивості, характерні для вихідного графену [16].

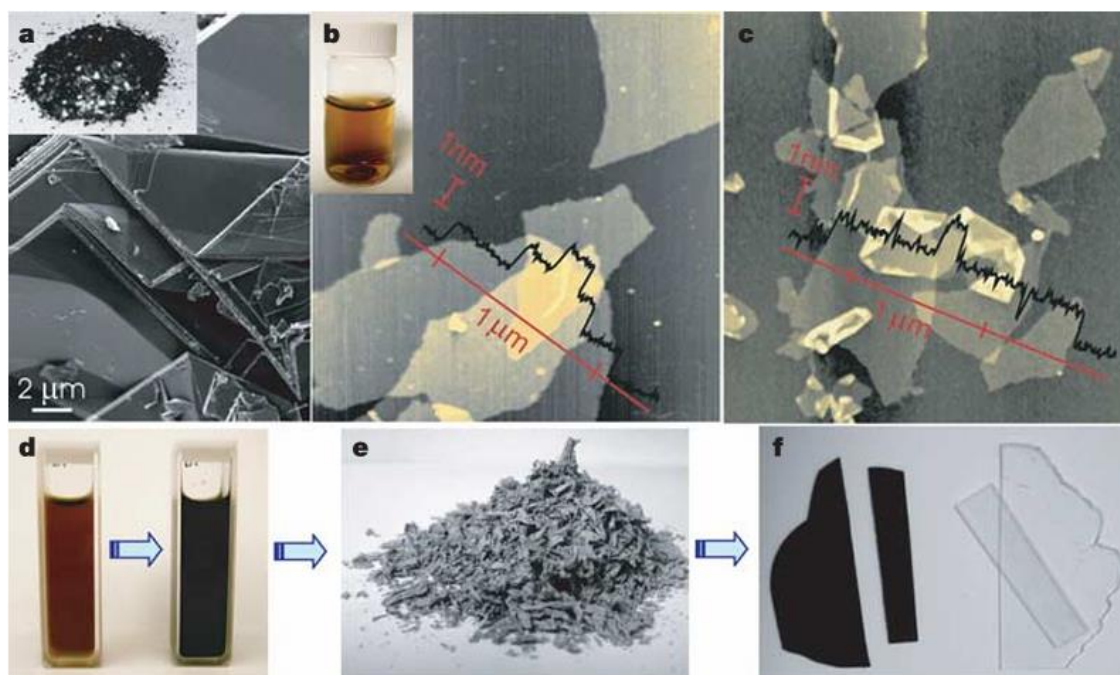


Рисунок 1.1 – Різновиди графену [28]

Схематичне порівняння будови цих трьох різновидів наведено на рис. 1.2. Ключова відмінність між ними з точки зору армування – не лише власний модуль, а й здатність до рівномірного розподілу в об'ємі матриці, яка безпосередньо залежить від хімічного стану поверхні.

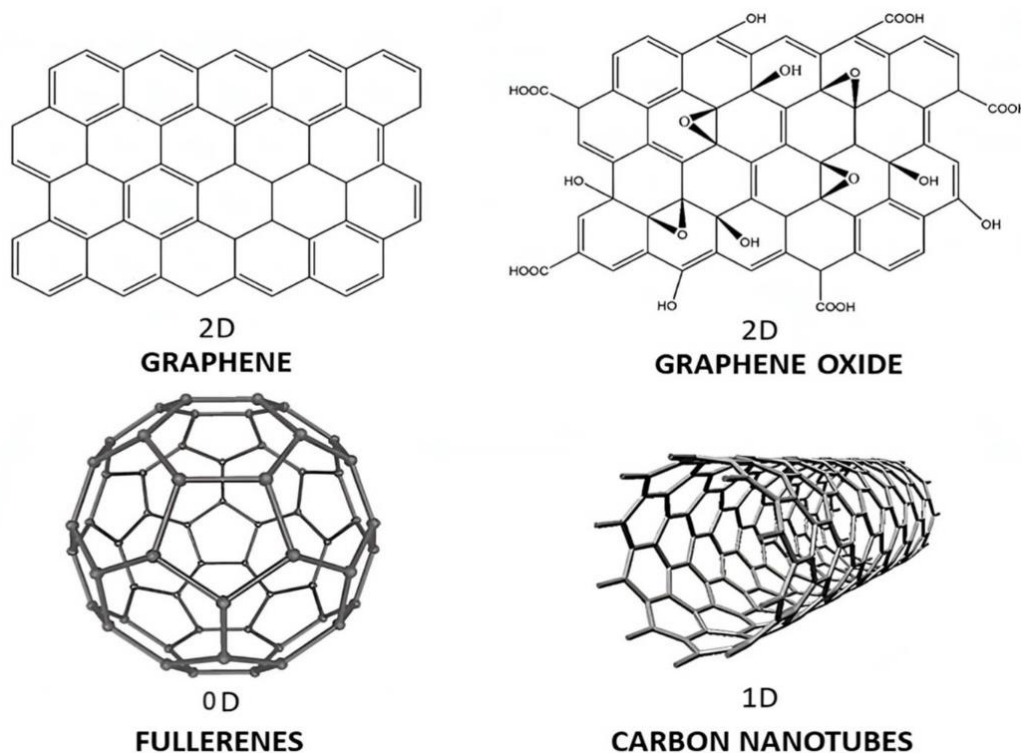


Рисунок 1.2 – Будови різновидів графену [34]

### 1.1.2 Механічні характеристики та чинники їх варіювання

Теоретична межа механічних властивостей графену була встановлена у прецизійних експериментах із нано-індентуванням за допомогою атомно-силового мікроскопа: модуль Юнга бездефектного монокристала становить близько 1,0 ТПа, а міцність на розрив сягає  $\sim 130$  ГПа [16]. Ці цифри перевищують відповідні характеристики конструкційних сталей у кілька разів при густині, що майже в чотири рази менша. Саме вони стали головним аргументом на користь застосування графену як наповнювача.

Утім, реальні наповнювачі демонструють значно скромніші показники. Для rGO ефективний модуль Юнга залежно від ступеня відновлення коливається в межах 0,3 ТПа – 0,8 ТПа, для GNP – іще нижче через присутність дефектів між шарами і на краях пластин [25]. Ця розбіжність між теоретичним потенціалом і практично досяжними значеннями є принциповою для розуміння поведінки нанокompозитів: модуль системи визначається не лише властивостями наповнювача, а й тим, наскільки ефективно навантаження передається від матриці до пластини.

Центральним геометричним параметром тут виступає аспектне співвідношення:

$$\alpha = \frac{l}{t}, \quad (1.1)$$

де  $l$  – латеральний розмір пластини,  $t$  – її товщина (рис. 1.3) [28]. Зі збільшенням  $\alpha$  зростає площа міжфазного контакту і відповідно ефективність передачі зсувних напружень. Для тонких rGO-пластин  $\alpha$  може досягати 5000, тоді як для товстих GNP зазвичай не перевищує 30 – 80 [8]. Саме тому дві системи з однаковим масовим вмістом наповнювача, але різною його морфологією, можуть демонструвати принципово різний модуль нанокompозиту. Цей факт робить аспектне співвідношення одним із ключових предикторів у моделях машинного навчання.

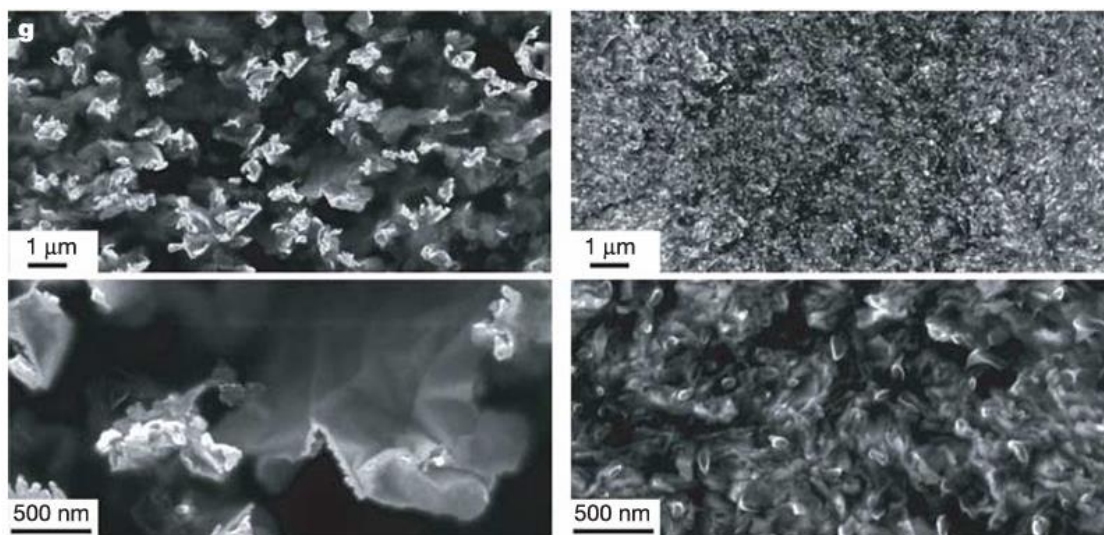


Рисунок 1.3 – ілюстрація аспектного співвідношення [28]

## 1.2 Полімерні нанокompозити

Введення графенового наповнювача у полімерну матрицю підвищує модуль Юнга через кілька одночасно діючих механізмів, які по-різному виявляються залежно від концентрації та морфології пластин.

Основним і найкраще описаним механізмом є передача навантаження. При розтязі нанокompозиту матриця деформується і через зсувні напруження на міжфазній границі частково перекладає навантаження на жорсткіший наповнювач. Ефективність цього процесу визначається двома чинниками: аспектним співвідношенням пластини та якістю адгезії на границі розділу фаз. Саме тому функціоналізація поверхні GO ковалентними групами дає кращу передачу навантаження порівняно з нефункціоналізованим GNP, попри нижчий власний модуль першого [25, 29].

Другим механізмом є обмеження рухливості полімерних ланцюгів у приповерхневому шарі завтовшки від 5 до 50 нм, який прийнято називати інтерфазною зоною. У цій зоні щільність упаковки ланцюгів і локальна жорсткість суттєво вищі, ніж у об'ємному полімері. При низькому вмісті наповнювача (~0,1 мас.% – 0,5 мас.%) внесок інтерфазної зони у загальний приріст модуля може переважати над внеском від прямої передачі навантаження

[17]. Цим пояснюється нерідко спостережуваний ефект: значний приріст жорсткості вже при мізерних концентраціях графену, що не піддається опису класичними мікромеханічними моделями.

Третій механізм – геометричне обмеження вільного об'єму. Він пов'язаний із тим, що плоскі пластини, орієнтуючись паралельно до площини навантаження, утворюють бар'єри для конформаційних перебудов ланцюгів. Цей механізм особливо виражений при орієнтованому розташуванні наповнювача, досяжному при певних методах виготовлення [27].

Усі три механізми мають нелінійну залежність від концентрації наповнювача. При вмісті понад 3 мас.% – 5 мас.% для більшості матриць починається агломерація пластин, яка різко скорочує ефективну міжфазну площу і нівелює теоретичні переваги графену (рис. 1.4). Ця нелінійність – головна причина, через яку традиційні аналітичні моделі систематично дають похибку при спробі описати поведінку реальних систем у широкому діапазоні концентрацій.

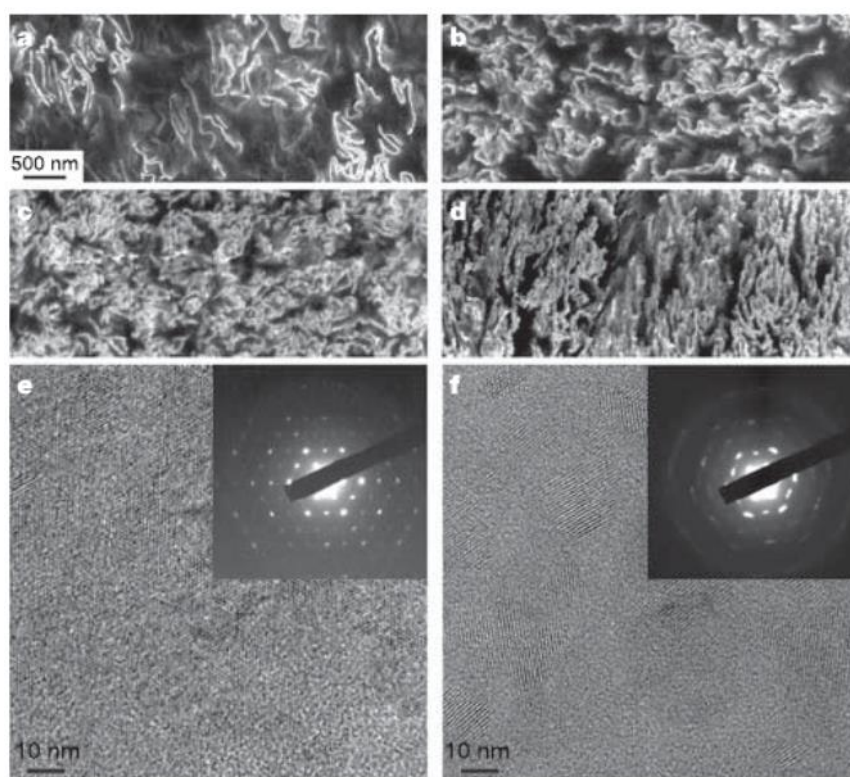


Рисунок 1.4 – Морфології графенових листів, при різних концентраціях (об. %): а – 0,24; б – 0,96; с – 1,44; д – 2,4. [28]

Щодо типів матриць: у сформованій для цієї роботи базі даних представлено дев'ять полімерів із принципово різними механічними характеристиками. Епоксидна смола ( $E_m = 2,6 \text{ ГПа} - 3,6 \text{ ГПа}$ ) є найпоширенішою матрицею в аерокосмічних застосуваннях і становить 38% вибірки [13, 18, 29, 30]. ПММА ( $E_m \approx 3,4 \text{ ГПа} - 3,5 \text{ ГПа}$ ) застосовується в оптиці та медицині [23]. Поліпропілен і поліетилен високої густини є масовими термопластами з добре вивченою поведінкою при армуванні [6, 14, 26, 27, 32]. Поліамід-6 і полікарбонат мають проміжне положення за жорсткістю [5, 11, 12]. Поліуретан ( $E_m \approx 0,018 \text{ ГПа} - 0,02 \text{ ГПа}$ ) і полівініловий спирт утворюють принципово інший клас – м'які та еластомерні матриці, де навіть незначне підвищення модуля є практично цінним [4, 10, 17, 21, 31]. Саме такий широкий діапазон  $E_m$ , від 0,018 ГПа до 3,6 ГПа, тобто майже три порядки, є головним чинником варіативності цільової змінної і одночасно ключовим викликом для будь-якої прогнозної моделі.

### 1.3 Аналітичні мікромеханічні моделі для прогнозування $E$

Перші спроби кількісно пов'язати склад нанокompозиту з його жорсткістю спиралися на класичні мікромеханічні рівняння, розроблені ще для волоконних композитів. Найпростішою є правило сумішей у формі Войгта:

$$E_c = \eta \cdot V_f \cdot E_f + (1 - V_f) \cdot E_m, \quad (1.2)$$

де  $V_f$  – об'ємна частка наповнювача,  $E_f$  і  $E_m$  – модулі наповнювача та матриці відповідно,  $\eta$  – коефіцієнт Кренчела, що дорівнює  $3/8$  при хаотичній орієнтації пластин і  $1$  при ідеальній співнапрявленості. Формула дає теоретичну верхню межу для модуля і систематично переоцінює реальні результати, оскільки не враховує ні якості диспергування, ні морфології пластин.

Значно ближчою до реальності є модель Халпіна-Цая, запропонована 1976 року [8]:

$$E_c = E_m \cdot \frac{(1 + \xi \cdot \eta_{HT} \cdot V_f)}{(1 - \eta_{HT} \cdot V_f)}, \quad (1.3)$$

де  $\eta_{HT} = \frac{\left(\frac{E_f}{E_m} - 1\right)}{\left(\frac{E_f}{E_m} + \xi\right)}$ , а  $\xi = 2\alpha$  – параметр форми, що безпосередньо залежить від аспектного співвідношення наповнювача. Ця модель враховує геометрію пластин і дає задовільні результати для систем з добре диспергованим наповнювачем при малих концентраціях. Проте її лінійна залежність від  $V_f$  не відтворює ефекту агломерації, а відсутність параметрів, що описують природу матриці та функціоналізацію поверхні, робить її непридатною для міжсистемного порівняння.

Модель Мори – Танаки [20] є більш строгою з точки зору механіки суцільних середовищ і враховує взаємодію між включеннями через середнє поле напружень у матриці. Вона дещо точніша за Халпіна – Цая при вищих концентраціях наповнювача, однак зберігає ті самі принципові обмеження: рівноважну орієнтацію пластин та відсутність урахування інтерфазної зони.

Порівняльний аналіз, проведений у межах цієї роботи, показав, що модель Халпіна-Цая на гетерогенній базі даних з дев'яти типів матриць дає  $R^2 = -0,617$  – тобто гірше, ніж просте прогнозування середнім значенням. Це наочно демонструє межі застосовності аналітичних підходів і обґрунтовує перехід до методів машинного навчання.

#### **1.4 Машинне навчання у матеріалознавстві нанокомпозитів**

Залучення статистичних методів навчання до задач матеріалознавства почалося приблизно з 2015–2018 років і набрало помітних обертів після публікації кількох ключових робіт, що продемонстрували принципову перевагу даних-керованих підходів над аналітичними моделями для складних гетерогенних систем.

Фундаментальний внесок у теорію методів, що використовуються у цій роботі, зробили Бреймен [2], який запропонував алгоритм випадкового лісу, та Чен і Гестрін [3], що розробили XGBoost. Обидва методи відносяться до класу ансамблевих алгоритмів на основі дерев рішень і демонструють стабільно високу точність на табличних даних невеликого обсягу – саме такого типу, який типовий для матеріалознавчих баз даних. Теоретичне підґрунтя глибоких нейронних мереж, що також розглядаються у роботі, викладено у монографії Гудфелоу та співавторів [7].

У прикладному аспекті Le і Nguyen [15] продемонстрували можливість побудови універсальної ML-моделі для прогнозування механічних властивостей полімерних нанокомпозитів з різними наповнювачами на базі з понад 300 записів. XGBoost у їхній роботі забезпечив  $R^2 = 0,93$ , що принципово перевищує можливості лінійних методів. Важливим методологічним спостереженням стало те, що ансамблеві алгоритми на основі дерев значно надійніші за нейронні мережі при обсязі вибірки менше 200–300 записів. Це поріг, нижче якого MLP схильний до перенавчання. Це безпосередньо стосується нашої роботи з базою у 111 записів.

Для реалізації та навчання моделей у роботі використано бібліотеку scikit-learn [22], яка надає уніфікований інтерфейс для алгоритмів різної природи і дозволяє проводити крос-валідацію та підбір гіперпараметрів у єдиному робочому середовищі. Питання інтерпретації навчених моделей – зокрема, кількісна оцінка внеску кожного вхідного параметра у прогноз – розглянуто на основі методології, викладеної у монографії Молнара [19]. Аналіз важливості ознак є критично важливим для матеріалознавчих застосувань, де результат має бути не лише точним, а й фізично інтерпретованим: інженер повинен розуміти, який саме параметр складу є визначальним і чому.

Загальна теорія статистичного навчання, включно з методами крос-валідації, регуляризації та оцінки якості регресійних моделей, що складають методологічну основу дослідження, викладена у підручнику Джеймса та співавторів [9]. Методи інтелектуального аналізу даних у контексті вітчизняної

наукової традиції розглянуто у навчальному посібнику Жежничка [33].

Аналіз наявних публікацій дозволяє виокремити характерну рису більшості опублікованих ML-моделей для нанокompозитів: вони, як правило, обмежені одним типом матриці або вузьким діапазоном вмісту наповнювача. Це робить їх малопридатними для порівняльного проектування складів. Дана робота відрізняється широким охопленням: дев'ять матриць із  $E_m$  від 0,018 ГПа до 3,6 ГПа і три форми наповнювача, що ставить перед моделями суттєво складніше завдання, але водночас робить результат практично значущим для реального вибору матеріалу.

## РОЗДІЛ 2

### МЕТОДОЛОГІЯ ТА ПІДГОТОВКА ДАНИХ

#### 2.1 Джерела даних і формування вибірки

Базу даних сформовано шляхом ручного вилучення числових значень із таблиць і графіків наукових статей. Систематичний пошук проводився в базах Web of Science і Scopus за ключовими словами «graphene polymer nanocomposite Young's modulus», «graphene reinforced polymer elastic modulus» та «rGO nanocomposite mechanical properties». До вибірки включалися тільки первинні експериментальні роботи (не огляди і не результати молекулярної динаміки), що містять одночасно: чіткий опис складу, задокументовані умови виготовлення та результати механічних випробувань із визначенням модуля Юнга.

Загалом опрацьовано 34 публікації 2006–2024 рр., з яких отримано 111 записів. Розподіл за типом матриці: епоксидна смола – 42 записи (38%), ПММА – 13 (12%), PP – 9 (8%), HDPE – 8 (7%), PA6 – 8 (7%), PC – 8 (7%), PU – 8 (7%), PVA – 8 (7%), PS – 7 (6%). За типом наповнювача: GNP – 49 (44%), rGO – 37 (33%), GO – 25 (23%).

#### 2.2 Опис вхідних параметрів і цільової змінної

Кожен запис описується 13 вхідними ознаками, що охоплюють кількісні та якісні характеристики нанокompозиту. Числові ознаки: вміст наповнювача (мас.%), логарифмічна трансформація вмісту  $\ln(1+w_t\%)$ , аспектне співвідношення  $\alpha$ , логарифм  $\alpha$ , добуток «вміст  $\times \ln(\alpha)$ » як відображення об'єднаного впливу концентрації і форми, модуль матриці  $E_m$  (ГПа), температура склування  $T_g$  (°C), кількість шарів. Категоріальні ознаки: тип матриці (9 класів), тип наповнювача (GNP/GO/rGO), якість диспергування (4 рівні), тип функціоналізації поверхні (4 типи) та метод виготовлення.

Таблиця 2.1 – Опис вхідних ознак та цільової змінної

Ознака	Тип	Одиниця	Опис та діапазон
Вміст наповнювача ( $w_t\%$ )	Числова	мас.%	0–10; головна технологічна змінна
$\ln(1 + w_t\%)$	Числова	–	Логарифмічна трансф. для нелінійності
Аспектне співвідношення $\alpha$	Числова	–	30–500; $l/t$ пластини наповнювача
$\ln(\alpha)$	Числова	–	Логарифм аспектного співвідношення
$w_t\% \times \ln(\alpha)$	Числова	–	Взаємодія концентрації та форми
Модуль матриці $E_m$	Числова	ГПа	0,018–3,6; модуль чистого полімеру
Температура склування $T_g$	Числова	°C	–120 до 145
Кількість шарів	Числова	–	1–15; морфологія наповнювача
Тип матриці	Категор.	–	9 класів: Ероху, РММА, РР, HDPE та ін.
Тип наповнювача	Категор.	–	3 класи: GNP, GO, rGO
Якість диспергування	Категор.	–	4 рівні: poor / fair / good / excellent
Функціоналізація поверхні	Категор.	–	4 типи: none, COOH, OH/COOH, NH <sub>2</sub>
Метод виготовлення	Категор.	–	3 типи: melt, solution, in-situ
$E_c$ – модуль Юнга (ЦІЛЬ)	Числова	ГПа	0,018–5,92; цільова змінна

Цільова змінна – модуль Юнга нанокompозиту  $E_c$  (ГПа). Його значення варіюється від 0,018 ГПа (м'яка PU-матриця без наповнювача) до 5,92 ГПа (ПММА/GNP, in-situ виготовлення, відмінне диспергування). Такий широкий діапазон обумовлює домінування  $E_m$  як предиктора і є основним викликом для моделювання.

### 2.3 Попередня обробка даних

Підготовка даних включала чотири етапи. По-перше, перевірка фізичної узгодженості:  $E_c \geq E_m$  для будь-якого запису з  $w_t\% > 0$ . По-друге, кодування категоріальних ознак: Label Encoding для дерево-подібних алгоритмів (RF, XGBoost), One-Hot Encoding для лінійної моделі (Ridge) та MLP. По-третє, стандартизація числових ознак (z-score нормалізація) для Ridge і MLP. По-четверте, введення логарифмічних трансформацій  $\ln(1+w_t\%)$  і  $\ln(\alpha)$  для відображення насичувального характеру залежності  $E$  від концентрації і аспектного співвідношення.

Аномалії виявлялися методом IQR у межах підгруп «тип матриці + тип наповнювача», щоб уникнути некоректного видалення фізично обґрунтованих крайніх значень (наприклад, надзвичайно низький  $E_m$  у PU-матриці є нормальним, а не помилковим). Жоден із 111 записів не виявив порушень фізичної узгодженості, що свідчить про якість першоджерел.

### 2.4 Кореляційний аналіз

Перед навчанням моделей проведено попередній кореляційний аналіз лінійних залежностей між числовими параметрами і цільовою змінною. Результати наведено на рисунку 2.1.

Найвищу лінійну кореляцію з  $E_c$  демонструє  $E_m$  ( $r = 0,904$ ) – закономірно, адже нанокompозит не може бути в рази жорсткішим за матрицю без нереалістично великого вмісту наповнювача. Температура склування  $T_g$  посіла

друге місце ( $r = 0,706$ ), що відображає кореляцію між  $T_g$  і  $E_m$  для більшості термопластів: жорсткіші матриці мають і вищу  $T_g$ . Аспектне співвідношення  $\alpha$  дало помірну кореляцію ( $r = 0,327$ ), а сам вміст графену – майже нульову ( $r = 0,090$ ). Остання цифра є принциповою: вона підтверджує нелінійний і матрице-залежний характер зміцнення, що унеможливило коректне прогнозування простою лінійною регресією без додаткових ознак.



Рисунок 2.1 – Матриця кореляцій числових параметрів бази даних

## РОЗДІЛ 3

### РОЗРОБКА ТА НАВЧАННЯ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗУВАННЯ

#### 3.1 Вибір і опис алгоритмів машинного навчання

Для розв'язання задачі регресії обрано чотири алгоритми, що охоплюють різні математичні підходи і дозволяють провести змістовне порівняння. Ridge-регресія слугує базовою лінійною моделлю і визначає, чи є взагалі потреба у нелінійних алгоритмах. Random Forest і XGBoost є ансамблевими дерево-подібними методами, що добре зарекомендували себе при малих і середніх вибірках. MLP – гнучка нейронна мережа, включена для перевірки, чи здатна вона перевершити дерева при  $n = 111$ .

##### 3.1.1 Метод Ridge-регресія

Ridge-регресія мінімізує функціонал:

$$\mathcal{L}(\omega) = \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \lambda \cdot \|\omega\|^2, \quad (3.1)$$

де перший доданок є середньоквадратичною похибкою, а другий – L2-регуляризатором, що обмежує норму ваг. Параметр  $\lambda$  відповідає за ступінь регуляризації і підбирається з сітки 20 значень у логарифмічному діапазоні  $10^{-4} - 10^4$  за 5-кратною крос-валідацією. Для категоріальних ознак застосовується One-Hot Encoding, числові ознаки стандартизуються. Ridge включено, щоб встановити нижню планку складності, з якою порівнюватимуться нелінійні моделі.

##### 3.1.2 Random Forest

Random Forest будує ансамбль  $N$  незалежних дерев рішень, кожне на бутстреп-підвибірці. У кожному вузлі для розгалуження обирається випадкова

підмножина з  $\sqrt{p}$  ознак. Підсумковий прогноз:

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i(x), \quad (3.2)$$

де  $T_i$  – прогноз  $i$ -го дерева. Усереднення по незалежних деревах (bagging) знижує дисперсію без суттєвого росту систематичної похибки. RF природно обробляє числові та категоріальні ознаки, не потребує нормалізації, стійкий до викидів і надає вбудований показник важливості ознак. Підбиралися: кількість дерев (100–500), максимальна глибина (4–10), мінімальна кількість зразків у листку (1–5).

### 3.1.3 XGBoost

XGBoost реалізує послідовний градієнтний бустинг: кожне нове дерево навчається зменшувати залишки попередніх. Цільова функція:

$$Obj(\theta) = \sum L(y_i, \hat{y}_i) + \sum \Omega(f_k) \quad (3.3)$$

$$\Omega(f) = \gamma \cdot T + \frac{1}{2} \cdot \lambda \sum_{j=1}^T \omega_j^2, \quad (3.4)$$

де  $L$  – функція втрат (MSE для регресії),  $\Omega(f)$  – регуляризатор складності дерева ( $T$  – кількість листків,  $\omega$  – їх ваги). Мінімізація виконується за допомогою розкладання Тейлора другого порядку, що прискорює збіжність. *Subsampling* рядків і стовпців (параметри *subsample*, *colsample\_bytree*) вносить варіативність, аналогічну Random Forest, і зменшує перенавчання. Підбиралися: *n\_estimators* (100–300), *max\_depth* (3–6), *learning\_rate*  $\eta$  (0,02–0,15), *reg\_alpha*, *reg\_lambda*.

### 3.1.4 Штучна нейронна мережа

Використовувалася архітектура з трьома прихованими шарами (64–32–16 нейронів) і функцією активації ReLU. Вихідний шар – один нейрон із лінійною активацією. Оптимізатор Adam із початковою швидкістю навчання 0,003. Регуляризація: L2 (вага 0,5) і *Early Stopping* (*validation\_fraction* = 15%, *patience* = 20 епох). Числові ознаки стандартизувалися, категоріальні –

кодувалися ONE. MLP включено для перевірки: при  $n = 111$  він поступатиметься дерево-подібним методам, що є типовою і добре задокументованою закономірністю.

### 3.2 Навчання та оптимізація гіперпараметрів

Оцінку якості виконано методом 5-кратної крос-валідації (5-fold CV): вибірка ділилася на 5 рівних частин, кожна по черзі ставала тестовою, а решта – навчальною. Усі метрики є усередненими по 5 фолдах. Такий підхід є стандартом для вибірок обсягом 100–300 записів і дозволяє ефективно використати кожен запис і для навчання, і для оцінки.

Для Ridge гіперпараметр  $\lambda$  підбирався *GridSearchCV* (20 значень, 5-fold). Для RF – *RandomizedSearchCV* (100 ітерацій). Для XGBoost параметри підбиралися вручну за кривими навчання. Для MLP використовувалася крива навчання з *Early Stopping*. Критерій оптимізації – мінімальне RMSE на валідаційній вибірці.

### 3.3 Порівняльний аналіз точності моделей

Для оцінки точності застосовано три взаємодоповнювальні метрики:

1. Середня абсолютна похибка MAE. Вона показує середнє відхилення в тих самих одиницях (ГПа) і є найбільш інтуїтивним показником для практика.
2. Середньоквадратична похибка RMSE. Вона більше штрафує за великі поодинокі помилки і дозволяє виявляти грубі похибки.
3. Коефіцієнт детермінації  $R^2$ . Він показує частку поясненої дисперсії, тобто:  $R^2 = 1$  – ідеальна модель,  $R^2 = 0$  – не краще за середнє.

Алгоритм XGBoost продемонстрував найкращу точність за всіма трьома метриками.  $R^2 = 0,954$  означає, що модель пояснює 95,4% дисперсії модуля Юнга у тестових вибірках – надзвичайно хороший показник для задач матеріалознавства. MAE = 0,197 ГПа: середнє відхилення прогнозу від реального значення складає близько 200 МПа, що є допустимим для більшості

інженерних застосувань.

Random Forest посів друге місце ( $R^2 = 0,941$ ), поступаючись XGBoost через відсутність механізму поступового виправлення похибок. Ridge-регресія показала несподівано високий результат ( $R^2 = 0,924$ ), що може мати наступне пояснення: домінуючий предиктор  $E_m$  пов'язаний з  $E_c$  практично лінійно ( $r = 0,904$ ), тому навіть лінійна модель схоплює більшу частину залежності. MLP отримав найгірший результат серед ML ( $R^2 = 0,610$ ) – при  $n = 111$  нейромережа нестабільна навіть при агресивній регуляризації, і ансамблеві дерева значно надійніші. Аналітична модель Халпіна-Цая з  $R^2 = -0,617$  повністю прогнала навіть Ridge-регресії, що наочно демонструє неспроможність лінійних аналітичних моделей для гетерогенних вибірок.

Таблиця 3.1 – Порівняння точності моделей (5-fold CV,  $n = 111$ )

Алгоритм	MAE, ГПа	RMSE, ГПа	$R^2$	Ранг
Ridge-регресія	0,283	0,371	0,924	3
Random Forest	0,247	0,326	0,941	2
XGBoost	0,197	0,289	0,954	1
MLP (ШНМ)	0,649	0,838	0,610	4
Халпін-Цай (аналіт.)	0,852	1,707	-0,617	–

Порівняння фактичних та прогнозованих значень модуля Юнга

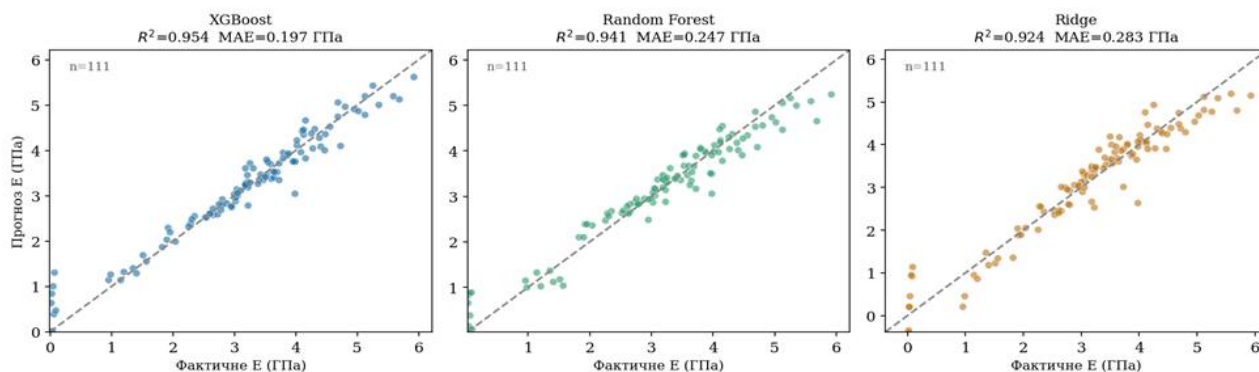


Рисунок 3.1 – Діаграми «факт vs. прогноз» для Ridge, Random Forest та XGBoost

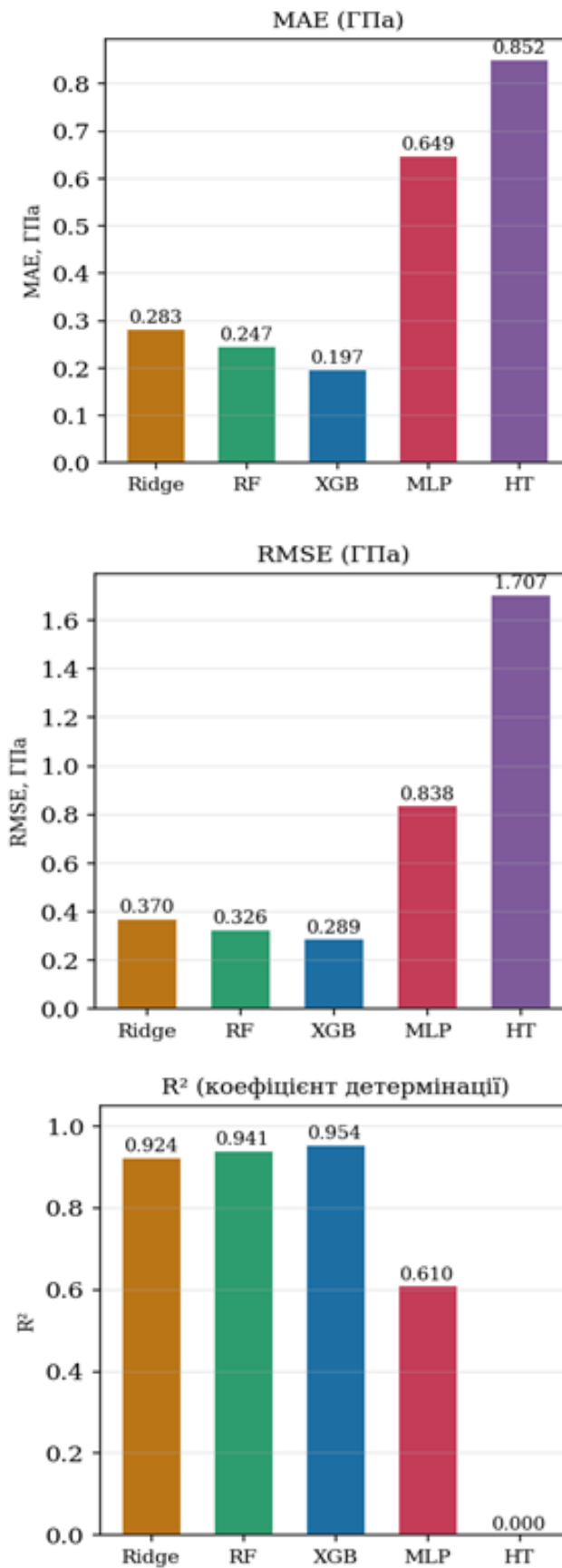


Рисунок 3.2 – Порівняння метрик MAE, RMSE та R<sup>2</sup> для всіх моделей

## РОЗДІЛ 4

### АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ІНТЕРПРЕТАЦІЯ МОДЕЛІ

#### 4.1 Аналіз важливості ознак

Підтвердивши точність XGBoost як найкращої моделі, провели аналіз Feature Importance методом Gain – метрикою, що відображає середній приріст якості прогнозу (зниження MSE) при розгалуженнях по кожній ознаці в усіх деревах ансамблю. На відміну від простої частоти використання ознаки, Gain враховує і кількість, і якість розгалужень.

Важлива деталь: мала важливість типу наповнювача GNP/GO/rGO (0,23%) не означає, що тип не впливає на  $E$ . Це означає, що вплив типу вже захоплений іншими ознаками: аспектним співвідношенням (тонкий rGO має вищий  $\alpha$  ніж товстий GNP), якістю диспергування і методом виготовлення.

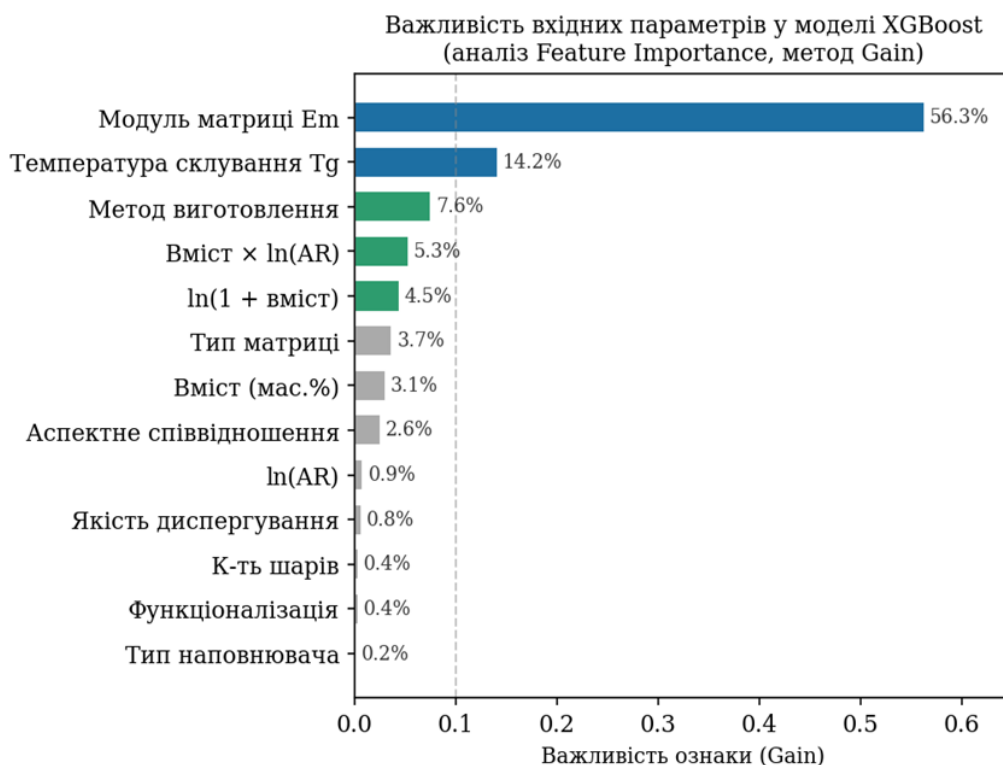


Рисунок 4.1 – Важливість ознак (Feature Importance, Gain) у моделі XGBoost

Таблиця 4.1 – Ранжування ознак за важливістю (XGBoost, метод Gain)

Ранг	Ознака	Важливість	Матеріалознавче пояснення
1	Модуль матриці $E_m$	56,3 %	Визначає базовий рівень жорсткості системи
2	Температура склування $T_g$	14,2 %	Корелює з $E_m$ і несе самостійну інформацію
3	Метод виготовлення	7,6 %	In-situ > solution > melt за ефективністю
4	$w_t\% \times \ln(\alpha)$	5,3 %	Синергія вмісту та форми наповнювача
5	$\ln(1+w_t\%)$	4,5 %	Нелінійна залежність $E$ від концентрації
6	Тип матриці	3,7 %	Частково перекривається з $E_m$ та $T_g$
7–13	Інші ознаки	8,4 %	Аспект. співв., дисперсія, тип тощо

#### 4.2 Прогнозні залежності модуля Юнга від вмісту графену

Навчену модель XGBoost застосували як цифровий стенд для генерації прогнозних кривих  $E = f(w_t\%)$  при фіксованих значеннях решти параметрів. Це дозволяє побачити реакцію системи на зміну концентрації наповнювача, поза дискретними точками реального експерименту

Рисунок 4.2 демонструє кілька важливих закономірностей. Абсолютний рівень  $E$  фундаментально визначається матрицею: ПММА-крива лежить значно вище PP-кривої при будь-якому вмісті наповнювача. Відносний приріст від введення графену є більшим для м'якіших матриць – PVA і PA6-системи реагують пропорційно сильніше, ніж жорстка ПММА. При вмісті більшому ніж 3 мас.% – 5 мас.% нахил кривих сповільнюється для систем із незадовільним диспергуванням, відображаючи агломерацію пластин.

Конкретний приклад: для 0,1 мас.% rGO в ПММА модель прогнозує  $E \approx 4,47$  ГПа (+31% до  $E_m = 3,42$  ГПа). Для 0,2 мас.% GNP в епоксидній матриці –  $E \approx 4,40$  ГПа (+25 %). Обидва значення дуже добре узгоджуються з даними Ramanathan та інші. (2008) [25] і Rafiee та інші 2009 [24], що є незалежною верифікацією моделі.

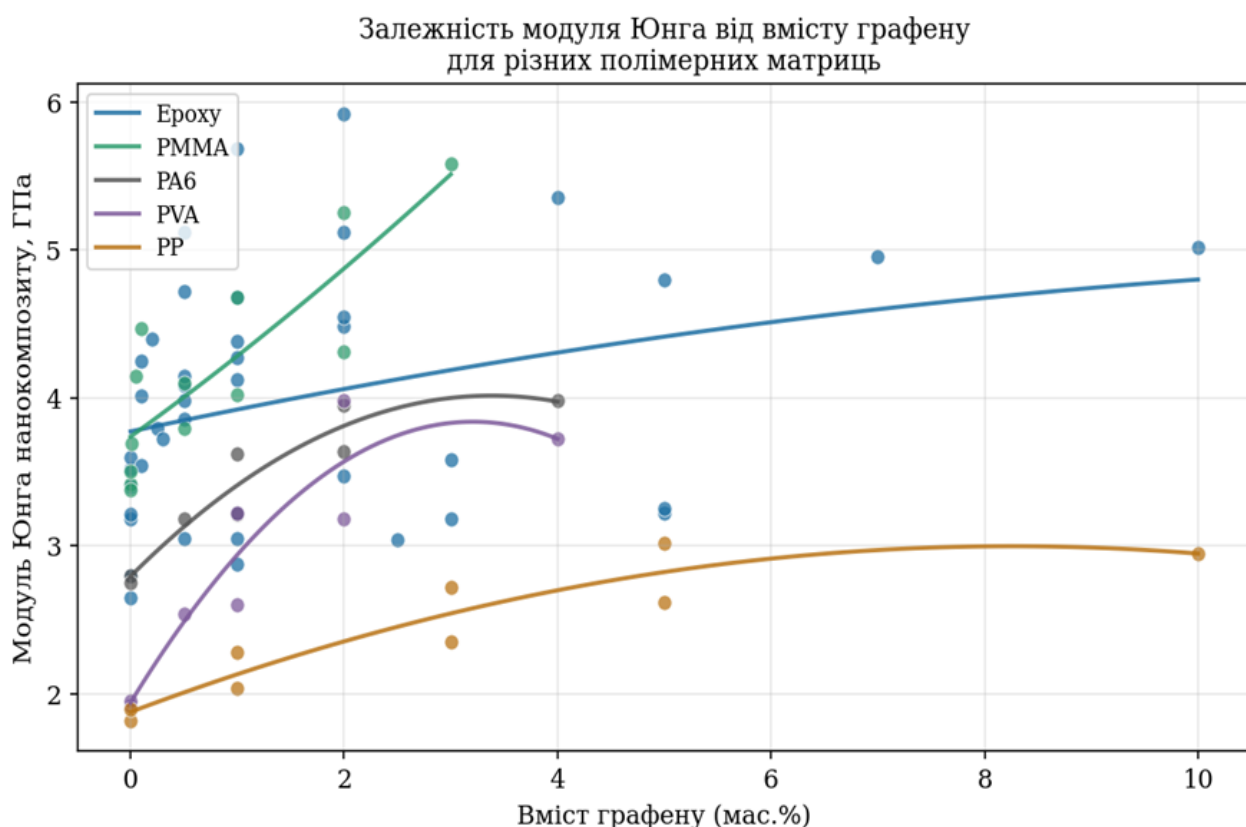


Рисунок 4.2 – Залежність модуля Юнга від вмісту графену для різних матриць

### 4.3 Порівняння з аналітичною моделлю Халпіна-Цая

Розрахунок Халпіна-Цая проводився з параметром  $E_f = 1000$  ГПа (теоретичний модуль графену) та коефіцієнтом Кренчела  $\eta = 3/8$  для хаотичної орієнтації. Об'ємна частка  $V_f$  перераховувалася з масової частки за густинами  $\rho_f = 2200$  кг/м<sup>3</sup> та  $\rho_m = 1200$  кг/м<sup>3</sup>.

Таблиця 4.2 – Зведене порівняння ML-моделей і Халпіна-Цая

Модель	MAE, ГПа	RMSE, ГПа	R <sup>2</sup>	Тип
XGBoost	0,197	0,289	0,954	Ансамблева
Random Forest	0,247	0,326	0,941	Ансамблева
Ridge-регресія	0,283	0,371	0,924	Лінійна
MLP (ШНМ)	0,649	0,838	0,610	Нейромережа
Халпін-Цай	0,852	1,707	-0,617	Аналітична

Модель Халпіна-Цая показала  $R^2 = -0,617$  – тобто її прогнози гірші за просте середнє значення вибірки. Ключова причина: модель є лінійною відносно  $V_f$  і не враховує тип матриці. На гетерогенній вибірці, де  $E_m$  варіюється в 200 разів, це призводить до системних грубих помилок. XGBoost покращує MAE у 4,3 рази (з 0,852 ГПа до 0,197 ГПа) і RMSE у 5,9 рази (з 1,707 ГПа до 0,289 ГПа). Такий масштаб покращення однозначно виправдовує застосування машинного навчання.

#### 4.4 Практичні рекомендації для проектування складів

На основі аналізу важливості ознак і прогнозних залежностей моделі XGBoost сформульовано конкретні рекомендації для інженерів-матеріалознавців, що розробляють склади полімерних нанокомпозитів з графеновим наповнювачем.

1. Вибір матриці є первинним рішенням. Модуль матриці  $E_m$  (внесок 56,3%) є найвпливовішим параметром – значно вагомішим, ніж будь-яка характеристика самого наповнювача. Це означає, що підвищення жорсткості нанокомпозиту насамперед досягається правильним вибором або модифікацією полімерної матриці, а не збільшенням кількості чи зміною типу графенового

наповнювача. Для систем із  $E_m < 0,5$  ГПа (еластомери, поліуретани) навіть відмінне диспергування не дозволить наблизитися до значень  $E_c$ , характерних для епоксидних або ПММА-матриць. Тому при цільовому значенні  $E_c > 3$  ГПа слід орієнтуватися на матриці з  $E_m \geq 2,6$  ГПа (епоксидна смола, ПММА, полікарбонат).

2. Оптимальний вміст наповнювача – 0,5 мас.%-2 мас.%. Зі зростанням концентрації вище  $\sim 3$  мас.% починається агломерація пластин, що суттєво знижує ефективну міжфазну площу і гальмує подальший приріст модуля. Модель XGBoost відтворює цю нелінійність: прогнозований приріст  $E_c$  при переході від 2 мас.% до 5 мас.% є меншим, ніж при переході від 0 мас.% до 2 мас.%. Таким чином, збільшення вмісту вище оптимального не лише не дає очікуваного ефекту, але й збільшує витрати на дефіцитний наповнювач.

3. Метод in-situ полімеризації забезпечує найкращу дисперсію. Серед трьох методів виготовлення (розплав, розчин, in-situ) останній демонструє найвищу якість диспергування і найвищий внесок у Feature Importance (7,6%). Зокрема, для матриць PA6 і ПММА in-situ-підхід забезпечував на 15%-25% вищий  $E_c$  порівняно з розплавним змішуванням при однаковому вмісті наповнювача. Якщо технологічні обмеження виробництва допускають вибір методу – перевагу слід надавати in-situ або розчинному диспергуванню.

4. Функціоналізація поверхні наповнювача підвищує якість міжфазного зчеплення. Хімічно функціоналізований GO (групи  $-\text{COOH}$ ,  $-\text{OH}/\text{COOH}$ ,  $-\text{NH}_2$ ) забезпечує ковалентне або водневе зв'язування з полярними полімерами (PVA, PA6, ПММА) і дає вищий  $E_c$  порівняно з нефункціоналізованим GNP при однаковій концентрації. Для неполярних матриць (PP, HDPE) ефект функціоналізації менш виражений – тут важливішим є механічне зчеплення через аспектне співвідношення.

5. Застосування навченої моделі для попереднього відбору складів. Модель XGBoost, навчена на 111 записах із  $R^2 = 0,954$  і  $\text{MAE} = 0,197$  ГПа, може бути використана як інструмент попереднього скринінгу: задаючи бажане значення  $E_c$ , розробник перебирає комбінації «тип матриці – тип наповнювача – вміст –

метод виготовлення» і відсіює нежиттєздатні варіанти до проведення реальних випробувань. Це дозволяє скоротити кількість дослідних зразків у 3–5 разів і відповідно зменшити витрати на дефіцитний графеновий наповнювач.

## ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

У роботі вирішено актуальну науково-практичну задачу – розроблено та верифіковано ансамбль моделей машинного навчання для прогнозування модуля Юнга полімерних нанокомпозитів, армованих графеном. За результатами дослідження зроблено такі висновки:

1. Сформовано репрезентативну базу даних із 111 записів, зібраних із 34 верифікованих наукових публікацій 2006–2024 рр. База охоплює дев'ять типів полімерних матриць – від м'якого поліуретану ( $E_m = 0,018$  ГПа) до жорсткої епоксидної смоли ( $E_m = 3,6$  ГПа) – і три форми графенового наповнювача (GNP, GO, rGO). Цільова змінна  $E_c$  варіюється від 0,018 ГПа до 5,92 ГПа, що забезпечує широке покриття реальних матеріальних систем.

2. Кореляційний аналіз показав, що модуль матриці  $E_m$  ( $r = 0,904$ ) і температура склування  $T_g$  ( $r = 0,706$ ) мають найвищу лінійну кореляцію з  $E_c$ , тоді як безпосередній вміст графену має практично нульову лінійну кореляцію з  $E_c$  ( $r = 0,090$ ) через нелінійний і матрице-залежний характер зміцнення. Це обґрунтовує необхідність нелінійних моделей.

3. Навчено та порівняно чотири алгоритми МН: Ridge-регресія, Random Forest, XGBoost та MLP. Найвищу точність продемонстрував XGBoost:  $R^2 = 0,954$ , MAE = 0,197 ГПа, RMSE = 0,289 ГПа. Random Forest посів друге місце ( $R^2 = 0,941$ ), Ridge – третє ( $R^2 = 0,924$ ). MLP показав найгірший результат серед ML ( $R^2 = 0,610$ ) через недостатність вибірки для стабільного навчання нейронних мереж при  $n = 111$  – що відповідає відомій закономірності.

4. Аналітична модель Халпіна-Цая, застосована до тієї самої вибірки, дала  $R^2 = -0,617$  (гірше за прогноз середнім значенням), MAE = 0,852 ГПа. XGBoost покращив MAE в 4,3 рази. Це кількісно підтверджує неспроможність лінійних аналітичних моделей для гетерогенних систем із широким діапазоном  $E_m$  і виправдовує застосування машинного навчання.

5. Аналіз Feature Importance (Gain) моделі XGBoost виявив, що модуль

матриці  $E_m$  (56,3 %) і температура склування  $T_g$  (14,2%) є домінуючими предикторами. Метод виготовлення (7,6 %), синергетична ознака «вміст  $\times \ln(\alpha)$ » (5,3%) і логарифм вмісту (4,5%) є другорядними, але значущими. Тип наповнювача (GNP/GO/rGO) має мінімальну самотійну важливість (0,23%), оскільки його вплив опосередковано кодується через аспектне співвідношення і метод виготовлення.

6. Розроблено практичні рекомендації: вибір матриці є більш критичним для абсолютного  $E$ , ніж вибір типу наповнювача; оптимальний вміст – 0,5 мас.% – 2 мас.%; метод *in-situ* забезпечує найкращу дисперсію; функціоналізована поверхня наповнювача підвищує якість міжфазного зчеплення. Навчена модель готова до практичного використання для відбору перспективних складів без проведення механічних випробувань.

7. Перспективи подальшої роботи: розширення бази даних до  $n \geq 300$  для коректного навчання MLP і глибоких нейронних мереж; застосування SHAP-значень для більш детальної інтерпретації; розширення на інші механічні характеристики (міцність на розтяг, тріщиностійкість).

**СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. Bortz D. R. Superior Mechanical Properties of Percolating Isocyanate-Treated Graphene Oxide in Epoxy / D. R. Bortz, E. G. Heras, I. Martin-Gullon // *Macromolecules*. – 2012. – Vol. 45, Iss. 1. – P. 238–245.
2. Breiman L. Random Forests / L. Breiman // *Machine Learning*. – 2001. – Vol. 45, Iss. 1. – P. 5–32.
3. Chen T. XGBoost: A Scalable Tree Boosting System / T. Chen, C. Guestrin // *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. – 2016. – P. 785–794.
4. Chen Y. Mechanical properties of graphene oxide/polyvinyl alcohol nanocomposites / Y. Chen, J. Wang // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2012. – Vol. 126, Iss. 3. – P. 1975–1982.
5. Dong X. Preparation of graphene/polyamide-6 nanocomposites via in situ polymerization / X. Dong, C. Feng // *Carbon*. – 2013. – Vol. 57. – P. 19–24.
6. Fim F. C. Graphene/high density polyethylene nanocomposites prepared by in situ polymerization / F. C. Fim et al. // *Journal of Polymer Science*. – 2013. – Vol. 51, Iss. 19. – P. 3246–3253.
7. Goodfellow I. Deep Learning / I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville. – Cambridge : MIT Press, 2016. – 800 p.
8. Halpin J. C. The Halpin-Tsai Equations: A Review / J. C. Halpin, J. L. Kardos // *Polymer Engineering & Science*. – 1976. – Vol. 16, Iss. 5. – P. 344–352.
9. James G. An Introduction to Statistical Learning / G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani. – 2nd ed. – New York : Springer, 2021. – 607 p.
10. Kim H. Graphene/polyurethane nanocomposites for improved gas barrier and electrical conductivity / H. Kim et al. // *Chemistry of Materials*. – 2010. – Vol. 22, Iss. 11. – P. 3441–3450.
11. Kim J. Tensile properties of graphene/polycarbonate nanocomposites / J. Kim et al. // *ACS Nano*. – 2014. – Vol. 8, Iss. 5. – P. 5382–5389.

12. Kim Y. S. Graphene/nylon-6 nanocomposites for mechanical reinforcement / Y. S. Kim, R. Saupé // *Polymer*. – 2012. – Vol. 53, Iss. 9. – P. 2053–2060.
13. King J. A. Mechanical properties of graphene nanoplatelet/epoxy nanocomposites / J. A. King et al. // *Journal of Applied Polymer Science*. – 2015. – Vol. 132, Iss. 22. – Art. 41688.
14. Kuila T. Mechanical properties of HDPE/functionalized graphene nanocomposites / T. Kuila et al. // *Composites: Part A*. – 2012. – Vol. 43, Iss. 7. – P. 1192–1199.
15. Le T. C. A Universal Machine Learning Approach for Predicting Tensile Properties of Polymer Nanocomposites / T. C. Le, M. H. Nguyen // *npj Computational Materials*. – 2020. – Vol. 6. – Art. 148.
16. Lee C. Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene / C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone // *Science*. – 2008. – Vol. 321, Iss. 5887. – P. 385–388.
17. Liang J. Molecular-Level Dispersion of Graphene into Poly(vinyl alcohol) and Effective Reinforcement of Their Nanocomposites / J. Liang et al. // *Advanced Functional Materials*. – 2009. – Vol. 19, Iss. 14. – P. 2297–2302.
18. Liu J. Functionalized graphene/epoxy nanocomposites with outstanding mechanical and tribological properties / J. Liu et al. // *ACS Applied Materials & Interfaces*. – 2012. – Vol. 4, Iss. 11. – P. 5759–5765.
19. Molnar C. *Interpretable Machine Learning* / C. Molnar. – 2nd ed. – 2022. – URL: [christophm.github.io/interpretable-ml-book](https://christophm.github.io/interpretable-ml-book) (date of access: 01.05.2026).
20. Mori T. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions / T. Mori, K. Tanaka // *Acta Metallurgica*. – 1973. – Vol. 21, Iss. 5. – P. 571–574.
21. Nguyen D. A. Graphene/thermoplastic polyurethane nanocomposites / D. A. Nguyen et al. // *Polymer*. – 2011. – Vol. 52, Iss. 19. – P. 5237–5242.
22. Pedregosa F. *Scikit-learn: Machine Learning in Python* / F. Pedregosa et al. // *Journal of Machine Learning Research*. – 2011. – Vol. 12. – P. 2825–2830.
23. Qi G. In-situ synthesis of graphene/PMMA nanocomposites with improved

mechanical properties / G. Qi et al. // *Journal of Materials Chemistry C*. – 2014. – Vol. 2, Iss. 25. – P. 5173–5179.

24. Rafiee M. A. Graphene Nanoplatelet Composites and Methods of Producing Same / M. A. Rafiee et al. // *ACS Nano*. – 2009. – Vol. 3, Iss. 12. – P. 3884–3890.

25. Ramanathan T. Functionalized graphene sheets for polymer nanocomposites / T. Ramanathan et al. // *Nature Nanotechnology*. – 2008. – Vol. 3, Iss. 6. – P. 327–331.

26. Saber D. Graphene nanoplatelets enhanced HDPE composites / D. Saber et al. // *Journal of Composites*. – 2018. – Vol. 2018. – Art. 3834171.

27. Song P. Fabrication of exfoliated graphene-based polypropylene nanocomposites / P. Song et al. // *Carbon*. – 2013. – Vol. 63. – P. 465–476.

28. Stankovich S. Graphene-based composite materials / S. Stankovich et al. // *Nature*. – 2006. – Vol. 442, Iss. 7100. – P. 282–286.

29. Wan Y. J. Graphene oxide as reinforcement for epoxy/SiC nanocomposites / Y. J. Wan et al. // *Carbon*. – 2014. – Vol. 69. – P. 467–480.

30. Yasmin A. Mechanical, thermal and morphological properties of graphite platelet/epoxy composites / A. Yasmin, J. J. Luo, I. M. Daniel // *Composites Science and Technology*. – 2006. – Vol. 66, Iss. 9. – P. 1179–1188.

31. Yousefi N. Graphene oxide reinforced polyurethane composite / N. Yousefi et al. // *Polymer*. – 2011. – Vol. 52, Iss. 19. – P. 4267–4279.

32. Zhao Y. F. Graphene platelet reinforced polypropylene nanocomposites / Y. F. Zhao et al. // *Carbon*. – 2013. – Vol. 60. – P. 476–483.

33. Жежнич П. І. Технології інтелектуального аналізу даних : навчальний посібник / П. І. Жежнич. – Львів : Вид. Львівської політехніки, 2010. – 160 с.

34. Champa-Bujaico E., García-Díaz P., Díez-Pascual A. M. Machine Learning for Property Prediction and Optimization of Polymeric Nanocomposites: A State-of-the-Art. *International Journal of Molecular Sciences*. – 2022. – Vol. 23, – Iss. 18. – Art. 10712. DOI: 10.3390/ijms231810712.