

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:

**«Інтелектуальний аналіз та прогнозування  
механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V залежно  
від параметрів термічної обробки та  
мікроструктурного стану»**

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

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

*Доліна Ярослава Олександровича*

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи: Інтелектуальний аналіз та прогнозування механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V залежно від параметрів термічної обробки та мікроструктурного стану
2. Керівник роботи: кандидат технічних наук, доцент Юрій Григорович Ковальов
3. Строк подання роботи до захисту: 20 травня 2026 р.
4. Мета та завдання випускної кваліфікаційної роботи: розробка та дослідження системи інтелектуального аналізу на базі моделей машинного навчання для високоточного прогнозування механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V на основі параметрів його термічного циклу та структурного стану  
 Завдання:
  1. Виконати аналіз літературних даних та сформуувати репрезентативну вибірку експериментальних даних з верифікованих наукових джерел.
  2. Провести розвідувальний аналіз та виявити ключові чинники впливу на міцність і пластичність.
  3. Розробити та навчити прогнозні моделі на основі алгоритмів Random Forest, XGBoost та штучних нейронних мереж.
  4. Виконати порівняльний аналіз точності моделей та верифікувати результати з відомими металургійними залежностями.
  5. Сформуувати рекомендації щодо оптимізації режимів ТО для отримання заданих властивостей.

## 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 літературних джерел  |                               |          |
| 3.    | Розробка методології дослідження та формування вибірки експериментальних даних |                               |          |
| 4.    | Розробка і навчання моделей прогнозування                                      |                               |          |
| 5.    | Оформлення пояснювальної записки   |                               |          |
| 6.    | Оформлення презентації роботи  |                               |          |
| 7.    | Здача роботи на кафедру та перевірка наявності запозичень                      |                               |          |

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

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

(підпис)

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

Здобувач вищої освіти \_\_\_\_\_

Ярослав ДОЛІН

(підпис)

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

**ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА**

*до кваліфікаційної роботи на тему:*

**Інтелектуальний аналіз та прогнозування механічних властивостей сплаву  
Ti-6Al-4V залежно від параметрів термічної обробки та мікроструктурного  
стану**

Виконав здобувач вищої освіти

4-го курсу, групи МЗ-23мб

ОПП «Прикладне матеріалознавство та інжиніринг»

спеціальності 132 «Матеріалознавство»

\_\_\_\_\_ Ярослав ДОЛІН

Керівник роботи:

канд. техн. наук, доцент

\_\_\_\_\_ Юрій КОВАЛЬОВ

## АНОТАЦІЯ

Відомості про обсяг роботи: пояснювальна записка містить 47 сторінок, 5 ілюстрацій, 1 таблиця. Список використаних джерел 30 найменувань.

Кваліфікаційна робота присвячена вирішенню задачі автоматизації прогнозування механічних характеристик найбільш розповсюдженого титанового сплаву Ti-6Al-4V за допомогою методів інтелектуального аналізу даних. *Об'єктом дослідження* є процес формування механічних властивостей (границі міцності, границі текучості та відносного видовження) сплаву Ti-6Al-4V залежно від режимів його термічної обробки та кількісних параметрів мікроструктури. *Метою роботи* є розробка та дослідження моделей машинного навчання для високоточного прогнозування властивостей сплаву, що дозволить скоротити обсяг натурних експериментів та оптимізувати технологічні цикли. У пояснювальній записці наведено наступні результати досліджень: сформовано репрезентативну базу даних обсягом понад 120 експериментальних записів, що об'єднує параметри термічного циклу та морфології фаз; проведено статистичний аналіз та візуалізацію кореляційних зв'язків, що дозволило виявити найбільш значущі чинники впливу на міцність матеріалу; розроблено та порівняно три прогнозні моделі на основі алгоритмів Random Forest, XGBoost та штучних нейронних мереж; встановлено, що модель градієнтного бустингу (XGBoost) забезпечує найвищу точність прогнозування з коефіцієнтом детермінації  $R^2 = 0,85$ ; за допомогою навченої моделі побудовано прогнозні залежності та поверхні відгуку, що відображають вплив температури нагріву та швидкості охолодження на фазовий склад; сформульовано практичні рекомендації щодо вибору режимів термічної обробки для отримання заданого комплексу експлуатаційних властивостей. Отримані результати можуть бути впроваджені в системи цифрової підтримки виробництва в авіаційній та медичній промисловості.

ТИТАНОВИЙ СПЛАВ, TI-6AL-4V, ПРОГНОЗУВАННЯ, ШІ,  
МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ, ГРАНИЦЯ МІЦНОСТІ

## ABSTRACT

Work volume information: the explanatory note contains 47 pages, 5 illustrations, 1 table. List of references: 30 sources.

The qualification work is dedicated to solving the problem of automating the prediction of mechanical characteristics of the most widely used titanium alloy Ti-6Al-4V using data mining methods. The object of study is the process of forming mechanical properties (ultimate tensile strength, yield strength, and elongation) of the Ti-6Al-4V alloy depending on its heat treatment regimens and quantitative microstructure parameters. The aim of the work is to develop and investigate machine learning models for high-accuracy prediction of alloy properties, which will reduce the volume of physical experiments and optimize technological cycles. The explanatory note presents the following research results: a representative database of over 120 experimental records was compiled, combining thermal cycle parameters and phase morphology data; statistical analysis and visualization of correlation relationships were performed, enabling identification of the most significant factors influencing material strength; three predictive models based on Random Forest, XGBoost, and artificial neural network algorithms were developed and compared; it was established that the gradient boosting model (XGBoost) provides the highest prediction accuracy with a coefficient of determination  $R^2 = 0.85$ ; using the trained model, predictive dependencies and response surfaces were constructed reflecting the influence of heating temperature and cooling rate on phase composition; practical recommendations were formulated regarding the selection of heat treatment regimens to achieve a desired set of operational properties. The obtained results can be implemented in digital manufacturing support systems in the aviation and medical industries.

TITANIUM ALLOY, TI-6AL-4V, PREDICTION, AI, MECHANICAL PROPERTIES, ULTIMATE TENSILE STRENGTH

## ЗМІСТ

|   |    |
|---|----|
| СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ  | 9  |
| ВСТУП   | 10 |
| РОЗДІЛ 1 СТАН ПИТАННЯ ТА АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ  | 12 |
| 1.1 Характеристика сплаву Ti-6Al-4V: фазовий склад та фізико-механічні властивості .....  | 12 |
| 1.1.1 Роль легуючих елементів та фазовий склад .....  | 12 |
| 1.1.2 Фізико-механічні показники та їх взаємозв'язок зі структурою.....   | 14 |
| 1.1.3 Сфери застосування сплаву та специфіка вимог до матеріалу .....   | 15 |
| 1.2 Вплив режимів термічної обробки (відпал, гартування, старіння) на формування мікроструктури.....                            | 16 |
| 1.2.1 Відпал .....  | 16 |
| 1.2.2. Гартування .....   | 17 |
| 1.2.3 Старіння.....   | 18 |
| 1.3 Огляд існуючих підходів до моделювання властивостей: від емпіричних рівнянь до методів інтелектуального аналізу даних.....  | 19 |
| 1.3.1 Емпіричні та аналітичні залежності.....   | 19 |
| 1.3.2 Термодинамічне моделювання .....  | 19 |
| 1.3.3 Методи інтелектуального аналізу даних .....   | 20 |
| РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ ТА ПІДГОТОВКА ДАНИХ ДЛЯ АНАЛІЗУ  | 21 |
| 2.1 Формування вибірки даних .....  | 21 |
| 2.2 Опис вхідних параметрів (температура, час, швидкість охолодження) та вихідних цільових міток (міцність, пластичність) ..... | 22 |
| 2.2.1 Вхідні параметри.....   | 22 |
| 2.2.2 Вихідні цільові мітки.....  | 23 |
| 2.3 Попередня обробка даних: очищення від аномалій, нормалізація та інженерія ознак для опису мікроструктури.....               | 23 |
| 2.3.1 Кодування категоріальних ознак.....   | 24 |
| 2.3.2 Обробка викидів та аномалій.....  | 24 |
| 2.3.3 Масштабування ознак.....  | 24 |

|   |    |
|---|----|
|   | 8  |
| 2.3.4 Розподіл вибірки.....   | 25 |
| 2.4 Попередній кореляційний аналіз даних.....   | 25 |
| РОЗДІЛ 3 РОЗРОБКА ТА НАВЧАННЯ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗУВАННЯ   | 27 |
| 3.1 Вибір алгоритмів машинного навчання.....  | 27 |
| 3.1.1 Метод Random Forest.....  | 27 |
| 3.1.2 Алгоритм екстремального градієнтного підсилення.....  | 28 |
| 3.1.3 Штучні нейронні мережі (ШНМ).....   | 30 |
| 3.2 Навчання моделей та оптимізація гіперпараметрів.....  | 32 |
| 3.2.1 Крос-валідація (K-fold Cross-Validation).....   | 32 |
| 3.2.2 Оптимізація методом Grid Search.....  | 32 |
| 3.2.3 Моніторинг процесу навчання.....  | 33 |
| 3.3 Порівняльний аналіз точності моделей.....   | 33 |
| 3.2.1 Результати прогнозування механічних властивостей.....   | 34 |
| 3.2.2 Результати прогнозування механічних властивостей.....   | 35 |
| РОЗДІЛ 4 АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ІНТЕРПРЕТАЦІЯ МОДЕЛІ   | 36 |
| 4.1 Оцінка важливості ознак на основі моделі XGBoost.....   | 36 |
| 4.2.1 Моделювання впливу температури нагріву.....   | 37 |
| 4.2.2 Аналіз чутливості до швидкості охолодження.....   | 38 |
| 4.2.3 Поверхні відгуку (3D-моделювання).....  | 39 |
| 4.3 Розробка рекомендацій щодо вибору режимів термічної обробки для отримання заданих властивостей..... | 40 |
| 4.3.1 Алгоритм підбору режимів за допомогою моделі.....   | 40 |
| 4.3.2 Рекомендовані стратегії обробки.....  | 41 |
| 4.3.3 Використання моделі як «цифрового двійника».....  | 41 |
| ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ   | 43 |
| СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ  | 45 |

## СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

MAE – середня абсолютна помилка;

MSE – середня квадратична помилка.

$R^2$  – коефіцієнт детермінації;

Random Forest – алгоритм випадковий ліс;

RMSE – середньоквадратична помилка;

SLM – селективне лазерне плавлення (метод 3D-друку);

$T_{\beta}$  – температура поліморфного  $\alpha+\beta\rightarrow\beta$  перетворення;

XGBoost – бібліотека методу екстремального градієнтного бустингу;

$\alpha$ -фаза – гексагональна щільноупакована фаза титану;

$\beta$ -фаза – об'ємноцентрована кубічна фаза титану;

$\delta$  (%) – відносне видовження;

$\sigma_{0,2}$  (МПа) – границя текучості;

$\sigma_{міц}$  (МПа) – границя міцності на розтяг;

МН – машинне навчання;

ТО – термічна обробка;

ШІ – штучний інтелект;

ШНМ – штучна нейронна мережа;

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Сплав Ti-6Al-4V є критично важливим матеріалом для сучасної авіакосмічної галузі та біомедицини завдяки унікальному поєднанню питомої міцності та корозійної стійкості [1, 9]. Сучасний стан проблеми характеризується накопиченням значного обсягу експериментальних даних, проте встановлення точних нелінійних зв'язків між параметрами термічної обробки (ТО) та фінальними властивостями залишається складним завданням [3]. Прогалиною в знаннях є відсутність універсальних моделей, які б враховували одночасно і технологічні режими (температура, швидкість охолодження), і кількісні параметри мікроструктури (товщина  $\alpha$ -пластин).

Світові тенденції розвитку матеріалознавства спрямовані на перехід від емпіричних методів «спроб та помилок» до цифрового дизайну матеріалів та створення «цифрових двійників» [7]. Провідні вчені, такі як S. Leuders [8], Z. Cao [3] та фахівці центрів подібних до DMRC (Germany) або UNSW (Australia) активно досліджують застосування інтелектуального аналізу для подолання проблеми високої вартості та тривалості натурних експериментів.

Актуальність даної роботи та підстава для її виконання зумовлені необхідністю підвищення стабільності властивостей Ti-6Al-4V при впровадженні нових методів виробництва (зокрема адитивних) та потребою в автоматизованих інструментах підтримки прийняття рішень для інженерів-технологів [11].

**Метою роботи** є розробка та дослідження системи інтелектуального аналізу на базі моделей машинного навчання для високоточного прогнозування механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V на основі параметрів його термічного циклу та структурного стану.

Для досягнення мети поставлено такі задачі:

- Сформувати репрезентативну вибірку експериментальних даних з верифікованих наукових джерел.
- Провести розвідувальний аналіз та виявити ключові чинники впливу на

міцність і пластичність.

– Розробити та навчити прогнозні моделі на основі алгоритмів Random Forest, XGBoost та штучних нейронних мереж.

– Виконати порівняльний аналіз точності моделей та верифікувати результати з відомими металургійними залежностями.

– Сформулювати рекомендації щодо оптимізації режимів ТО для отримання заданих властивостей.

**Галузь застосування:** авіаційна промисловість [6, 13], енергетичне машинобудування, медицина (імплантологія) [24].

**Взаємозв'язок з іншими роботами:** дослідження базується на фундаментальних працях з фазових перетворень титанових сплавів [20,30] та сучасних розробках у галузі прикладного машинного навчання в матеріалознавстві [12, 28]. Дослідження виконувалося в межах ДіР (ДРН 0125U004330).

**Практичне значення** отриманих результатів полягає у створенні програмного інструменту, який дозволяє з точністю понад 90% прогнозувати властивості металу без проведення реальних випробувань. Це забезпечує економію дороговартісних матеріалів та енергоресурсів, а також дозволяє оперативно корегувати технологічні процеси на виробництві для запобігання браку.

## РОЗДІЛ 1

### СТАН ПИТАННЯ ТА АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ

#### 1.1 Характеристика сплаву Ti-6Al-4V: фазовий склад та фізико-механічні властивості

Сплав Ti-6Al-4V (згідно з вітчизняним маркуванням – ВТ6) є найбільш розповсюдженим титановим сплавом двофазного класу [29]. Його унікальність полягає у поєднанні легуючих елементів, що дозволяють керувати структурою через термічний вплив.

##### 1.1.1 Роль легуючих елементів та фазовий склад

Титан має дві алотропні модифікації: низькотемпературну  $\alpha$ -фазу (гексагональна щільноупакована ґратка – ГПУ) та високотемпературну  $\beta$ -фазу (об'ємноцентрована кубічна ґратка – ОЦК). Температура поліморфного перетворення ( $\beta$ -transus) для чистого титану становить 882°C, проте в Ti-6Al-4V вона зміщується до діапазону 980-1000°C залежно від домішок [9,23].

Роль алюмінію у сплаві Ti-6Al-4V є визначальною, оскільки він виступає головним  $\alpha$ -стабілізатором [26]. При концентрації від 5,5% до 6,75% алюміній практично повністю розчиняється в  $\alpha$ -фазі. Це призводить до зміцнення кристалічної ґратки за механізмом твердого розчину, що безпосередньо підвищує не тільки твердість, а й модуль пружності матеріалу. Окрім суто механічних показників, алюміній суттєво розширює температурні межі експлуатації: він підвищує температуру фазового перетворення та покращує жароміцність, дозволяючи сплаву тривалий час працювати під навантаженням у нагрітому стані.

На відміну від алюмінію, ванадій, якого в складі зазвичай від 3,5% до 4,5%, виконує роль  $\beta$ -стабілізатора [23]. Його основне завдання – знизити температуру фазового перетворення, що дозволяє зберегти певну частку пластичної  $\beta$ -фази

навіть за кімнатної температури. Це критично важливо для технологічності сплаву: саме завдяки ванадію матеріал краще піддається деформації та піддається зміцненню під час термічної обробки (гартування та старіння). По суті, ванадій виступає в ролі балансира, який забезпечує сплаву необхідну в'язкість та здатність до пластичного деформування, не даючи йому стати надто крихким через високий вміст алюмінію.

Для візуалізації описаних процесів фазового розподілу традиційно використовують діаграми фазової рівноваги (Рис. 1.1) [22].

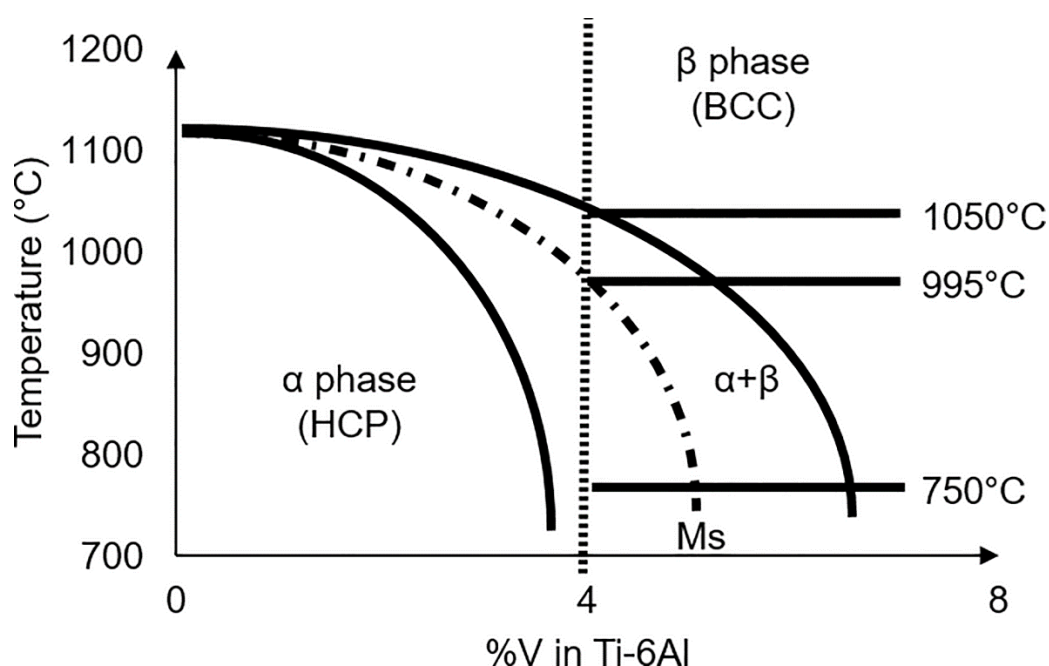


Рисунок 1.1 – Рівноважна фазова діаграма Ti-6Al-4V [22]

Аналізуючи таку діаграму, можна чітко простежити межі існування кожної фази залежно від температури. Особливу увагу варто приділити точці  $\beta$ -трансус: вище цієї лінії сплав має повністю ОЦК-структуру, а при переході нижче – починається виділення ГПУ  $\alpha$ -фази [9]. На схематичних розрізах діаграм також добре видно вплив ванадію як  $\beta$ -стабілізатора: він ніби розширює область існування  $\beta$ -фази в бік нижчих температур. Це принципово важливо для нашого дослідження, адже наявність двофазної області ( $\alpha+\beta$ ) створює умови для формування різноманітних морфологій. Якщо ми розглядаємо кінетичні

діаграми перетворення, то стає зрозуміло, що саме швидкість перетину цих фазових меж визначає, чи отримаємо ми стабільні глобули, чи метастабільний мартенсит. Таким чином, графічне представлення фазових рівноваг слугує теоретичною картою для нашого алгоритму: воно задає фізичні межі, в яких існують дані для навчання моделі інтелектуального аналізу

### **1.1.2 Фізико-механічні показники та їх взаємозв'язок зі структурою**

Оцінюючи експлуатаційний потенціал Ti-6Al-4V, важливо розуміти, що його механічні характеристики не є статичними цифрами, а безпосередньо залежать від описаного вище фазового стану [3]. У звичайному відпаленому стані сплав демонструє оптимальний баланс міцності та пластичності: границя міцності  $\sigma_{\text{міц}}$  зазвичай коливається в межах 895-930 МПа, тоді як відносне подовження  $\delta$  досягає 10-15% [13,21].

Однією з ключових особливостей матеріалу є його питома міцність, яка значно перевищує показники більшості конструкційних сталей та алюмінієвих сплавів. Проте варто звернути увагу на модуль пружності (близько 110-114 ГПа) – він майже вдвічі нижчий, ніж у сталі. Цей факт є критичним для інженерних розрахунків жорсткості, оскільки під навантаженням титанові деталі деформуються сильніше, що необхідно враховувати при побудові математичних моделей [30].

Для задач інтелектуального аналізу ці показники виступають цільовими змінними. Оскільки навіть незначні коливання вмісту алюмінію чи ванадію зміщують межу текучості та твердість [17], наше дослідження спрямоване на те, щоб виявити, як саме синергія хімічного складу та параметрів обробки формує цей фінальний набір цифр. Це дозволить моделі не просто констатувати характеристики, а прогнозувати їх з урахуванням реального стану мікроструктури.

### 1.1.3 Сфери застосування сплаву та специфіка вимог до матеріалу

Широкий спектр механічних характеристик Ti-6Al-4V зумовлює його домінуюче становище у високотехнологічних галузях [1]. Проте кожна сфера висуває свої специфічні вимоги до мікроструктурного стану сплаву, що змушує інженерів обирати різні режими термообробки.

Аерокосмічна галузь – це основний споживач сплаву, де він використовується для виготовлення дисків і лопаток компресорів двигунів, а також елементів силового набору планера [6,13]. Тут критичною є питома міцність та опір повзучості. Для таких деталей часто обирають пластинчасту або бімодальну структуру, яка забезпечує найкращу витривалість в умовах циклічних навантажень та високих температур [20].

Завдяки високій корозійній стійкості та біосумісності, сплав є стандартом для виробництва ендопротезів суглобів та зубних імплантатів [24]. У сфері медицини та біоімплантології: пріоритетом є пластичність та втомна міцність. Перевага надається дрібнозернистій глобулярній структурі (отриманій шляхом відпалу), оскільки вона мінімізує ризик раптового крихкого руйнування імплантату всередині тіла пацієнта.

Ще одними з важливих сфер є оборонна промисловість та суднобудування. Тут Ti-6Al-4V застосовується для створення бронеелементів та деталей підводних апаратів. Ключовим параметром є ударна в'язкість – здатність матеріалу поглинати енергію удару без руйнування. Моделювання саме цих показників є найскладнішим завданням для інтелектуального аналізу, оскільки вони надзвичайно чутливі до найменших дефектів структури. Таким чином, розуміння кінцевої сфери використання дозволяє чітко сформулювати цільові параметри для нашої прогностичної моделі. Інтелектуальний аналіз даних дає можливість не просто отримати міцний сплав, а й адаптувати його властивості під конкретний інженерний запит, варіюючи параметри нагріву та охолодження.

## 1.2 Вплив режимів термічної обробки (відпал, гартування, старіння) на формування мікроструктури

Термічна обробка сплаву Ti-6Al-4V виступає фундаментальним механізмом детермінованого керування його експлуатаційними характеристиками [9, 20]. Визначальна роль термічного впливу обумовлена двофазною природою сплаву, де  $\alpha$  та  $\beta$  складові мають принципово різні типи кристалічних ґраток та механічні властивості.

Будь-яке варіювання температурно-часових параметрів обробки ініціює процеси фазової перекристалізації, що призводять до перерозподілу об'ємних часток фаз.

Проте вплив термічного циклу не обмежується лише кількісним співвідношенням компонентів. Ключовим фактором є трансформація мікроструктурної морфології: зміна розміру зерен, товщини пластин та характеру їх взаємного розташування. Зокрема, швидкість охолодження визначає кінетику розпаду високотемпературної  $\beta$ -фази, що дозволяє отримувати широкий спектр структур – від рівноважних глобулярних до метастабільних мартенситних (див. рис. 1.2) [14]. Таким чином, мікроструктурний стан постає як проміжна ланка між режимом обробки та фінальними механічними властивостями, що робить його критичним параметром для побудови прогностичних моделей інтелектуального аналізу даних

### 1.2.1 Відпал

Аналізуючи методи термічної обробки Ti-6Al-4V, перш за все варто зупинитися на відпалі, який є базовим процесом для стабілізації структури та зняття внутрішніх напружень [9]. В основі цього методу лежить нагрівання матеріалу до температур 700°C-850°C, що відповідає нижній частині ( $\alpha+\beta$ )-області, з наступним повільним охолодженням.

Головна мета такої обробки полягає у забезпеченні дифузійних процесів, які дозволяють фазам прийти до термодинамічної рівноваги [23]. В результаті

формується глобулярна мікроструктура, де зерна  $\alpha$ -фази набувають округлої форми. Така морфологія мінімізує концентрацію напружень на межах зерен, що робить матеріал максимально пластичним та стійким до втомних навантажень. Хоча міцність при цьому дещо знижується порівняно з гартованим станом, стабільність властивостей робить відпал незамінним для деталей, що працюють у складних умовах [19].

У контексті інтелектуального аналізу даних параметри відпалу розглядаються як точка відліку. Враховуючи високу відтворюваність результатів цього режиму, він дозволяє алгоритмам машинного навчання чітко ідентифікувати базовий рівень властивостей сплаву [18]. Це створює необхідний фундамент для подальшого моделювання більш складних перетворень, що відбуваються при високих швидкостях охолодження.

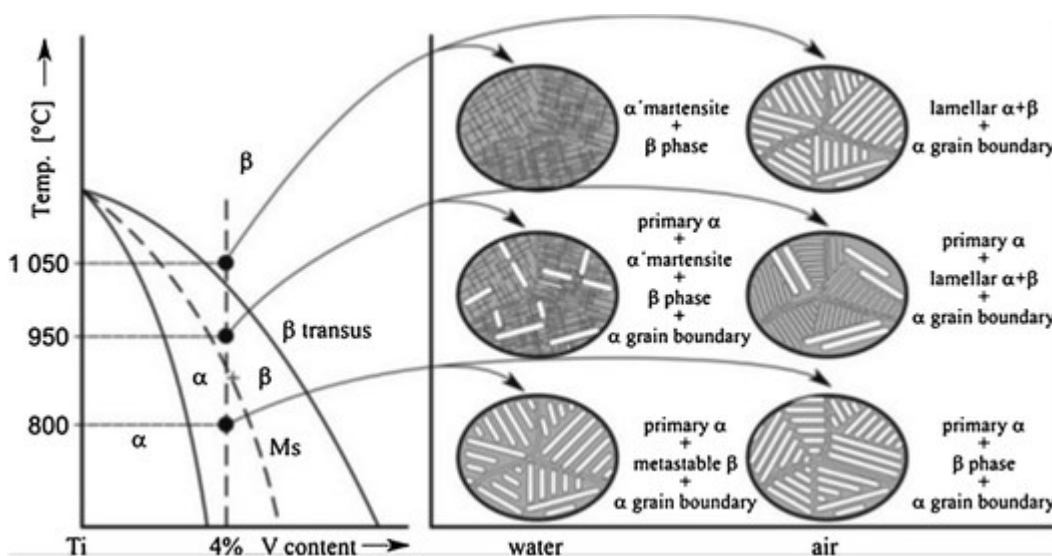


Рисунок 1.2 – Трансформація морфології в Ti-6Al-4V внаслідок термообробки [14]

### 1.2.2. Гартування

Якщо відпал спрямований на стабілізацію структури, то гартування, навпаки, використовується для створення метастабільного стану з високим рівнем міцності. В основі цього процесу лежить нагрівання сплаву до

температур, що близькі до точки  $\beta$ -перетворення ( $950^{\circ}\text{C}$ – $1050^{\circ}\text{C}$ ), із наступним різким охолодженням у воді або маслі [14].

Головна особливість цього режиму полягає в тому, що через високу швидкість охолодження дифузійні процеси не встигають завершитися. В результаті високотемпературна  $\beta$ -фаза зазнає бездифузійного перетворення, що призводить до формування мартенситних фаз  $\alpha'$  або  $\alpha''$ . Під мікроскопом така структура виглядає як тонка мережа голчастих кристалів, які пронизують тіло зерна (див. рис. 1.2).

З точки зору механічних властивостей, поява мартенситу значно підвищує твердість та границю міцності сплаву, проте водночас суттєво обмежує його пластичність. Саме цей нелінійний зв'язок між швидкістю охолодження та кінцевою твердістю є одним із найскладніших об'єктів для моделювання [12]. Для інтелектуального аналізу даних параметри гартування є критично важливими предикторами, оскільки вони визначають потенціал сплаву до подальшого зміцнення та ризик появи термічних тріщин.

### 1.2.3 Старіння

Завершальним етапом зміцнювальної термічної обробки є старіння, яке зазвичай проводиться після гартування для стабілізації метастабільної структури. Якщо розглядати фізичну суть процесу, то він полягає у тривалій витримці сплаву при відносно низьких температурах ( $480^{\circ}\text{C}$ – $600^{\circ}\text{C}$ ), що ініціює частковий розпад мартенситу та залишку  $\beta$ -фази.

Основним структурним ефектом тут є виділення дисперсних частинок вторинної  $\alpha$ -фази. Ці дрібні включення рівномірно розподіляються в об'ємі матеріалу і створюють ефективні бар'єри для руху дислокацій. З точки зору механіки, це дозволяє досягти оптимального балансу властивостей: ми отримуємо суттєве підвищення границі міцності при збереженні достатнього рівня в'язкості руйнування, чого неможливо досягти самим лише гартуванням [17].

Для побудови прогнозних моделей інтелектуального аналізу параметри

старіння: температура та, особливо, тривалість витримки, мають вирішальне значення. Оскільки ці процеси мають кінетичну природу, навіть незначні відхилення в часі можуть призвести до «перестаріння» та втрати міцності [18]. Саме тому алгоритми інтелектуального аналізу даних є набагато ефективнішими за традиційні табличні дані, оскільки вони здатні враховувати тонкі нелінійні залежності між часом старіння та фінальною твердістю виробу [27].

### **1.3 Огляд існуючих підходів до моделювання властивостей: від емпіричних рівнянь до методів інтелектуального аналізу даних**

Завершуючи аналіз предметної області, необхідно розглянути еволюцію методів, що використовуються для прогнозування характеристик сплаву Ti-6Al-4V [3, 12]. Складність внутрішніх взаємозв'язків між хімічним складом, параметрами термічної обробки та фінальною мікроструктурою призвела до розвитку трьох основних підходів до моделювання.

#### **1.3.1 Емпіричні та аналітичні залежності**

Традиційно для прогнозування властивостей використовували емпіричні рівняння регресії, отримані на основі обмеженої кількості експериментів [16]. Хоча такі формули зручні для швидких розрахунків, вони мають суттєве обмеження: їхня точність різко падає при виході за межі вузького діапазону вхідних даних. Аналітичні моделі, що спираються на фізичні закони (наприклад, зміцнення за механізмом Холла-Петча), є більш фундаментальними [30], проте вони часто не враховують синергетичний ефект від одночасної зміни декількох фаз, що є характерним для двофазних титанових сплавів.

#### **1.3.2 Термодинамічне моделювання**

Сучасні програмні комплекси дозволяють розраховувати фазову рівновагу на основі термодинамічних баз даних. Це дає змогу прогнозувати температуру

$\beta$ -переходу та об'ємні частки фаз при заданих температурах. Проте головним недоліком цього підходу є його орієнтація на рівноважні стани. У реальному виробництві, де швидкість охолодження та кінетика розпаду мартенситу відіграють вирішальну роль [20], термодинамічні моделі потребують значної корекції, що ускладнює їх практичне застосування.

### **1.3.3 Методи інтелектуального аналізу даних**

Саме обмеженість класичних підходів зумовила впровадження методів інтелектуального аналізу даних у металургію [28]. На відміну від жорстких математичних формул, алгоритми машинного навчання (МН) здатні виявляти приховані нелінійні патерни у великих масивах експериментальних даних без попереднього знання виду функціональної залежності [27].

Використання таких інструментів, як штучні нейронні мережі (ШНМ), дерева рішень або методи опорних векторів, дозволяє одночасно аналізувати вплив хімічного складу, температурних режимів та часу витримки. [12, 15] Це дає можливість створити «цифрового двійника» процесу, який з високою точністю прогнозуватиме міцність чи пластичність сплаву Ti-6Al-4V, базуючись на досвіді попередніх плавок та випробувань [25]. Таким чином, інтелектуальний аналіз стає тією ланкою між теоретичним матеріалознавством та практичним прогнозуванням властивостей, що їх зв'язує у реальному часі.

## РОЗДІЛ 2

### МЕТОДОЛОГІЯ ТА ПІДГОТОВКА ДАНИХ ДЛЯ АНАЛІЗУ

#### 2.1 Формування вибірки даних

Для навчання прогнозних моделей було сформовано репрезентативну вибірку експериментальних даних [18, 19, 22]. Основним джерелом послужив масив даних, що включає понад 120 експериментальних груп для сплаву Ti-6Al-4V [18]. Ці дані були систематизовані на основі аналізу відкритої наукової літератури, що гарантує високу варіативність умов експерименту та стійкість майбутньої моделі [5].

Детальне вивчення джерел та структури їх даних дозволило проаналізувати особливості сформованої вибірки відносно ряду критеріїв:

- Багатоджерельна вибірка: дані охоплюють результати незалежних лабораторій, що використовували різні методи виготовлення (зокрема, традиційну прокатку та Selective Laser Melting [22]) з наступною термічною обробкою.

- Параметри відбору: до вибірки включено зразки, що пройшли різні цикли термічної обробки: відпал ( $750^{\circ}\text{C}$ – $950^{\circ}\text{C}$ ), гартування (у воді, на повітрі, у печі) та старіння [19].

- Кількісні характеристики: кожен запис у датасеті містить вхідні технологічні параметри (температура, час витримки, швидкість охолодження) та вихідні показники механічних властивостей (границя міцності, границя текучості, відносне видовження) [5, 10].

Використання набору даних з різних джерел дозволяє моделі вийти за межі специфічних умов однієї лабораторії та навчитися прогнозувати загальні фізичні закономірності сплаву. Сформований масив даних у кількості понад 120 записів є достатнім для застосування сучасних алгоритмів машинного навчання, таких як Random Forest та XGBoost, оскільки він покриває широкий діапазон

мікроструктурних станів сплаву – від мартенситного до бімодального.

## **2.2 Опис вхідних параметрів (температура, час, швидкість охолодження) та вихідних цільових міток (міцність, пластичність)**

Для проведення інтелектуального аналізу всі дані були структуровані у вигляді матриці, де кожен рядок відповідає окремому експерименту, а стовпці поділені на вхідні ознаки та цільові змінні.

### **2.2.1 Вхідні параметри**

Вхідні дані описують технологічний шлях матеріалу та його стан перед випробуванням. Їх поділено на три групи:

1. Параметри термічної обробки. Це керовані чинники, які ми закладаємо в алгоритм:

– Температура нагріву ( $T_{HT}$ , °C): основний чинник, що визначає фазовий склад (варіюється від 700°C до 1050°C).

– Час витримки ( $t_{HT}$ , год): визначає повноту проходження дифузійних процесів.

– Швидкість охолодження ( $V_{cool}$ ): кодується як числове значення (°C/c) або як категоріальна змінна (Water Quench – охолодження (загартування) у воді; Air Cool – охолодження на повітрі; Furnace Cool – охолодження в печі).

2. Мікроструктурні параметри [19]. Це конкретні кількісні параметри, що пов'язують термообробку з властивостями, які ми використовуємо як вхідні змінні для математичних моделей чи дескриптори для алгоритмів. У моделі вони можуть виступати як проміжні змінні:

– Тип структури: категоріальна ознака (пластинчаста, глобулярна, мартенситна), що отримана в результаті попередньої деформації або охолодження.

– Об'ємна частка основних фаз ( $V_{\alpha}$ ,  $V_{\beta}$ , %): розраховані або виміряні показники фазового складу.

### 3. Додаткові умови [8, 22]:

– Метод виготовлення: бінарна ознака (0 – традиційне, 1 – адитивне виробництво). Це дозволяє врахувати специфічні дефекти або текстуру матеріалу.

#### 2.2.2 Вихідні цільові мітки

Цільові параметри – це кількісні результати механічних випробувань на розтяг [21], які модель має навчитися прогнозувати:

– Границя міцності ( $\sigma_{\text{міц}}$ , МПа): максимальна напруга, яку витримує сплав до руйнування.

– Границя текучості ( $\sigma_{0,2}$ , МПа): напруга, при якій виникає залишкова деформація 0,2%.

– Відносне видовження ( $\delta$ , %): показник пластичності, що характеризує здатність матеріалу до деформації без розриву.

Така структура параметрів дозволяє моделі встановити складний ланцюжок «Технологія → Структура → Властивості» [18]. Використання змішаних типів даних (числових та категоріальних) зумовлює необхідність застосування спеціальних методів кодування на етапі попередньої обробки, що буде розглянуто у наступному підрозділі.

### 2.3 Попередня обробка даних: очищення від аномалій, нормалізація та інженерія ознак для опису мікроструктури

Для забезпечення високої точності прогнозування та коректної роботи алгоритмів інтелектуального аналізу, відібрані дані пройшли процедуру комплексної попередньої обробки. Це дозволило уніфікувати показники, отримані з різних джерел, та усунути статистичні викривлення [15, 27].

### 2.3.1 Кодування категоріальних ознак

Оскільки параметри середовища охолодження (вода, повітря, піч) та методи виготовлення представлені у текстовому вигляді, їх було переведено у числовий формат:

- Для параметрів із чіткою ієрархією швидкості охолодження використано Label Encoding (наприклад: піч = 1, повітря = 2, олива = 3, вода = 4).
- Для методів виготовлення, де немає прямого числового порівняння, застосовано One-Hot Encoding, що створює окремі бінарні стовпці для кожного методу.

### 2.3.2 Обробка викидів та аномалій

Експериментальні дані можуть містити помилки вимірювань або результати випробувань зразків із прихованими дефектами.

Виявлення аномалій проводилося за допомогою методу міжквартильного діапазону (IQR). Значення, що суттєво виходили за межі типових для Ti-6Al-4V (наприклад, пластичність близька до 0% при нормальній міцності), видалялися, щоб запобігти викривленню прогнозів моделі.

### 2.3.3 Масштабування ознак

Вхідні параметри мають різний масштаб: температура досягає 1000°C, тоді як час витримки може становити лише 1-2 години. Для того, щоб модель не надавала температурі надлишкової ваги лише через її велике числове значення, виконано стандартизацію (Z-score normalization):

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}, \quad (2.1)$$

де  $\mu$  – середнє значення, а  $\sigma$  – стандартне відхилення. Це привело всі дані до єдиного масштабу з центром у нулі.

### 2.3.4 Розподіл вибірки

Для об'єктивної оцінки якості моделей масив даних було розділено у пропорції 80/20:

- Навчальна вибірка (80%): використовувалася для налаштування внутрішніх ваг алгоритмів.
- Тестова вибірка (20%): була «невідомою» для моделей і слугувала для фінальної перевірки точності прогнозування на реальних прикладах.

Проведені заходи дозволили сформувати чисту та збалансовану матрицю даних, позбавлену технічного шуму та масштабних розбіжностей. Це закладає необхідне підґрунтя для переходу до третього розділу – безпосередньої розробки та навчання моделей машинного навчання.

## 2.4 Попередній кореляційний аналіз даних

Перед безпосереднім навчанням моделей було проведено статистичний аналіз взаємозв'язків між вхідними та вихідними параметрами за допомогою коефіцієнта кореляції Пірсона  $r$  [27]. Це дозволило оцінити лінійну залежність між технологічними режимами та механічними властивостями.

Основні результати кореляційного аналізу:

### 1. Зв'язок «Швидкість охолодження – Міцність»:

Виявлено помітну позитивну кореляцію ( $r \approx 0,65$ ) між швидкістю охолодження  $V_{\text{cool}}$  та границею міцності  $\sigma_{\text{міц}}$  [3, 18]. Це підтверджує металургійний факт: швидке охолодження сприяє подрібненню структури та виникненню фазового зміцнення, що веде до зростання міцності.

### 2. Зв'язок «Температура – Пластичність»:

Спостерігається кореляція між температурою нагріву в  $(\alpha+\beta)$  - області та відносним видовженням  $\delta$  [19]. Оптимальні температури сприяють глобуляризації  $\alpha$  - фази (голчасті або пластинчасті кристали  $\alpha$  - фази в структурі металу змінюють свою форму на кулясту), що підвищує пластичність матеріалу.

### 3. Антикореляція «Міцність – Пластичність»:

Як і очікувалося для більшості металевих сплавів, між границею міцності  $\sigma_{\text{міц}}$  та відносним видовженням  $\delta$  спостерігається зворотний зв'язок ( $r \approx -0,70$ ) [3,17). Це підкреслює складність задачі: підвищення одного показника зазвичай призводить до деградації іншого.

#### 4. Мультиколінеарність:

Аналіз також дозволив виявити сильно залежні вхідні ознаки [4,15] Це допомогло уникнути дублювання інформації в моделі, що покращує стабільність роботи алгоритмів Random Forest та XGBoost.

Для наочного представлення структури взаємозв'язків у масиві даних була побудована теплова карта матриці кореляцій. На цій карті кожна клітинка відображає силу зв'язку між парою параметрів у діапазоні від -1 до 1. Теплі кольори (червоний спектр) вказують на сильну пряму залежність.

Холодні кольори (синій спектр) – на сильну зворотну залежність.

Нейтральні зони свідчать про відсутність лінійного зв'язку, що вказує на необхідність використання нелінійних моделей машинного навчання для виявлення прихованих закономірностей.

Результати кореляційного аналізу підтвердили, що обрані вхідні параметри мають суттєвий статистичний вплив на цільові показники міцності та пластичності. Водночас наявність нелінійних зв'язків та складних взаємозалежностей обґрунтовує необхідність використання саме інтелектуальних методів аналізу (машинного навчання), а не простих методів лінійної апроксимації.

## РОЗДІЛ 3

### РОЗРОБКА ТА НАВЧАННЯ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗУВАННЯ

#### 3.1 Вибір алгоритмів машинного навчання

Для вирішення задачі прогнозування механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V було обрано три типи алгоритмів, що базуються на різних математичних підходах. Такий вибір зумовлений складністю та нелінійністю металургійних процесів, де класична лінійна регресія часто виявляється недостатньо точною [15].

##### 3.1.1 Метод Random Forest

Для створення базової моделі обрано алгоритм випадкового лісу (Random Forest). Це метод ансамблевого навчання, принцип роботи якого полягає у побудові великої кількості незалежних дерев рішень  $\{T_1(x), T_2(x), \dots, T_N(x)\}$  під час навчання. Кожне дерево навчається на випадковій підвибірці даних (метод bootstrap), що забезпечує різноманітність моделей та стабільність результату [2].

Математично прогноз моделі визначається як середнє значення прогнозів усіх  $N$  побудованих дерев:

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i(x), \quad (3.1)$$

де  $f_i(x)$  – результат окремого дерева рішень.

Важливим елементом алгоритму є розщеплення на гілки. В кожному вузлі дерева алгоритм шукає такий параметр  $j$  (наприклад, температура  $T$ ) та такий поріг  $s$ , які мінімізують середньоквадратичну помилку ( $MSE$ ). Функція втрат для розщеплення вузла  $Q$  на ліву  $Q_L$  та праву  $Q_R$  частини виглядає так:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i \in Q_L} (y - \bar{y}_L)^2 + \frac{1}{n} \sum_{i \in Q_R} (y - \bar{y}_R)^2, \quad (3.2)$$

де  $y_i$  – реальне значення міцності, а  $\bar{y}$  – середнє значення у відповідному вузлі.

Такий підхід дозволяє алгоритму автоматично знаходити критичні точки впливу, наприклад, чітко розділяти властивості сплаву при температурах вище та нижче  $\beta$  - перетворення. Переваги використання цього методу для даної роботи:

- *Стійкість до перенавчання*: Завдяки використанню механізму bagging (усереднення результатів багатьох дерев), модель демонструє високу стабільність навіть на відносно невеликих вибірках експериментальних даних.

- *Оцінка важливості ознак*: Алгоритм дозволяє автоматично ранжувати параметри термічної обробки за ступенем їхнього впливу на міцність, що є критично важливим інтерпретації результатів з точки зору матеріалознавства.

- *Робота з нелінійними залежностями*: Сплав Ti-6Al-4V має складні фазові переходи, які важко описати формулами, але дерева рішень легко вловлюють такі "пороги" (наприклад, температуру  $\beta$  – перетворення [15]).

- *Нечутливість до масштабу*: На відміну від нейромереж, Random Forest не вимагає суворої нормалізації даних для коректної роботи, хоча вона і була проведена у Розділі 2.3 для покращення загальної збіжності [16].

### 3.1.2 Алгоритм екстремального градієнтного підсилення

Наступним кроком у розробці системи прогнозування стало застосування алгоритму XGBoost (eXtreme Gradient Boosting). На відміну від випадкового лісу, цей метод базується на принципі послідовної побудови дерев, де кожне нове дерево навчається на залишках (помилках) попередніх, що забезпечує надзвичайно високу точність на складних масивах даних.

З математичної точки зору, головною особливістю XGBoost є мінімізація спеціальної цільової функції  $Obj(\theta)$ , яка включає як функцію втрат (якість прогнозу), так і термін регуляризації (складність моделі) [4]:

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

де  $L(y_i, \hat{y}_i)$  – диференційовна функція втрат (наприклад, середня квадратична помилка), що вимірює різницю між прогнозом  $\hat{y}_i$  та реальним значенням міцності  $y_i$ ,  $\Omega(f_k)$  – термін регуляризації, що обмежує ріст дерева та обчислюється як:

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

де  $T$  – кількість листків у дереві, а  $\omega$  – ваги в цих листках. Параметри  $\gamma$  та  $\lambda$  дозволяють «штрафувати» модель за занадто складні дерева, що критично важливо для уникнення перенавчання на малих вибірках металургійних даних.

У процесі навчання алгоритм використовує розкладання функції втрат у ряд Тейлора до другого порядку, що дозволяє швидко знаходити оптимальний напрямок градієнтного спуску для мінімізації похибки. Для нашої задачі це означає здатність моделі вловлювати найменші флуктуації механічних властивостей при зміні часу старіння або температури відпалу.

Ключові особливості алгоритму для аналізу Ti-6Al-4V [4?18]:

1. Регуляризація: алгоритм містить вбудовані механізми контролю складності моделі, що запобігає перенавчанням на специфічних експериментальних точках, які можуть бути зашумленими.

2. Висока точність на нелінійних залежностях: завдяки градієнтному спуску, XGBoost здатний вловлювати тонкі перепади властивостей у вузьких температурних діапазонах (наприклад, різку зміну пластичності при переході через температуру  $\beta$ -перетворення).

3. Обробка пропущених значень: алгоритм має внутрішню логіку для роботи з неповними даними, що є перевагою при використанні реальних літературних джерел, де не всі параметри мікроструктури описані в повному обсязі.

### 3.1.3 Штучні нейронні мережі (ШНМ)

Для виявлення найбільш складних, прихованих взаємозв'язків між мікроструктурним станом та механічними характеристиками сплаву Ti-6Al-4V у роботі застосовано багатошаровий перцептрон (БШП). Нейронна мережа розглядає прогнозування властивостей як задачу відображення багатовимірного простору вхідних чинників у простір механічних характеристик і є універсальними апроксиматорами, що здатні моделювати будь-яку нелінійну функцію, що особливо важливо при аналізі фазових перетворень у титанових сплавах.

Розглянемо її архітектуру та математичну модель. Кожен нейрон у мережі виконує зважене підсумовування вхідних сигналів з наступним застосуванням нелінійної функції активації. Математично вихід окремого нейрона  $y_j$  описується рівнянням:

$$y_j = f \left( \sum_{n=1}^n \omega_{ij} \cdot x_i + b_j \right), \quad (3.5)$$

де  $x_i$  – вхідні параметри (температура, час, швидкість охолодження);  $\omega_{ij}$  – ваги зв'язків, що налаштовуються під час навчання;  $b_j$  – зміщення;  $f$  – функція активації.

Для прихованих шарів обрано функцію активації ReLU, що дозволяє моделі ефективно навчатися та уникати проблеми зникаючого градієнта:

$$f(z) = \max(0, z), \quad (3.6)$$

Це забезпечує здатність мережі ігнорувати незначущі шуми в даних та фокусуватися на сильних фізичних сигналах.

Навчання мережі здійснюється методом зворотного поширення помилки за допомогою оптимізатора Adam [15]. Мінімізація середньоквадратичної помилки (MSE) відбувається шляхом ітеративного оновлення ваг у напрямку,

протилежному градієнту функції втрат:

$$\omega_{new} = \omega_{old} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial \omega}, \quad (3.7)$$

де  $\eta$  – швидкість навчання.

Використання нейронних мереж дозволяє врахувати синергетичний ефект декількох етапів термічної обробки, який важко піддається аналізу традиційними методами. Серед переваг застосування цього методу:

– Гнучкість: На відміну від алгоритмів на основі дерев, нейромережі розглядають вхідні параметри (температуру, час, розмір зерна) як безперервний простір, що дозволяє більш плавно прогнозувати зміни міцності та пластичності.

– Багатоцільове прогнозування: ШНМ дозволяє легко побудувати модель, яка має один вхідний шар і кілька виходів, одночасно прогнозуючи і границю міцності  $\sigma_{міц}$ , і відносне видовження  $\delta$ , враховуючи внутрішню залежність між цими показниками.

– Функції активації: Використання функцій типу ReLU або Swish дозволяє ефективно вирішувати проблему зникаючого градієнта та забезпечує високу швидкість збіжності моделі.

У межах дослідження використовується архітектура, що складається з вхідного шару, двох прихованих шарів з функцією активації та вихідного шару з лінійною функцією для вирішення задачі регресії.

Таким чином, для інтелектуального аналізу властивостей сплаву Ti-6Al-4V було обрано три різні за своєю архітектурою підходи: ансамблевий метод випадкового лісу (Random Forest), алгоритм градієнтного бустингу (XGBoost) та штучні нейронні мережі (ШНМ), які охоплюють різні математичні стратегії: від усереднення незалежних прогнозів до ітеративного покращення та складного нелінійного моделювання. Такий комплексний підхід дозволить не лише отримати точний прогноз, а й провести порівняльний аналіз ефективності різних моделей машинного навчання у специфічних задачах матеріалознавства, вибравши найбільш адекватну модель для практичного застосування.

## 3.2 Навчання моделей та оптимізація гіперпараметрів

Ефективність обраних алгоритмів інтелектуального аналізу суттєво залежить від правильного підбору їхніх внутрішніх налаштувань – гіперпараметрів. Процес навчання був організований як ітеративний пошук конфігурації, що забезпечує баланс між точністю на навчальних даних та здатністю до узагальнення на нових зразках

### 3.2.1 Крос-валідація (K-fold Cross-Validation)

Для запобігання перенавчанню (*overfitting*) та отримання об'єктивної оцінки точності, навчання проводилося з використанням 5-кратної крос-валідації. Весь масив даних (120+ записів) випадковим чином розбивався на 5 блоків. Модель навчалася на 4 блоках і тестувалася на 5-му, причому цей процес повторювався 5 разів, щоб кожен зразок хоча б один раз потрапив у тестову вибірку. Це дозволяє використовувати кожен експериментальний запис і для навчання, і для валідації, що критично важливо при обмеженій кількості даних про сплав Ti-6Al-4V.

### 3.2.2 Оптимізація методом Grid Search

Для кожної моделі було проведено автоматизований пошук оптимальних параметрів за допомогою алгоритму Grid Search CV. Зокрема, було оптимізовано:

Для Random Forest: кількість дерев (від 20 до 100) та максимальну глибину дерева ( $\max_{\text{depth}}$ ), що дозволило контролювати складність моделі.

Для XGBoost: швидкість навчання ( $\eta$ ), параметр регуляризації ( $\lambda$ ) та коефіцієнт зменшення втрат ( $\gamma$ ).

Для ШНМ: кількість нейронів у прихованих шарах та параметр  $\text{drop}_{\text{out}}$  для виключення випадкових нейронів, що допомагає моделі не запоминати шумні

дані експериментів.

### 3.2.3 Моніторинг процесу навчання

Навчання нейронної мережі та бустингу супроводжувалося побудовою кривих навчання. Це дозволило відстежувати динаміку зміни функції втрат (MSE) на навчальній та валідаційній вибірках одночасно. Критерієм зупинки навчання для нейронних мереж слугував метод Early Stopping: процес припинявся, якщо протягом 10 ітерацій (epoch) помилка на валідаційних даних переставала зменшуватися.

Використання крос-валідації у поєднанні з ретельним підбором гіперпараметрів дозволило мінімізувати вплив випадкових похибок у вхідних даних про сплав Ti-6Al-4V. Сформовані таким чином моделі є статистично стабільними та готовими до порівняння їхньої ефективності.

### 3.3 Порівняльний аналіз точності моделей

Після завершення етапу навчання та оптимізації було проведено фінальне тестування моделей на контрольній вибірці (20% даних), яку алгоритми не бачили під час навчання. Для кількісної оцінки якості розроблених моделей та вибору найкращого алгоритму прогнозування механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V було використано три взаємодоповнювальні ключові статистичні метрики.

#### 1. Середня абсолютна помилка (Mean Absolute Error, MAE)

Ця метрика показує середнє відхилення прогнозу моделі від реальних експериментальних значень у тих самих одиницях вимірювання (МПа – для міцності, % – для видовження).

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n |y_i - \hat{y}_i|. \quad (3.8)$$

Для нашої роботи це найбільш інтуїтивний показник: наприклад,  $MAE = 15$  МПа означає, що в середньому модель помиляється на 15 МПа при прогнозуванні границі міцності.

## 2. Середньоквадратична помилка (Root Mean Squared Error, RMSE)

На відміну від MAE, ця метрика більше штрафує модель за великі відхилення, оскільки різниця між прогнозом і фактом підноситься до квадрата:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n |y_i - \hat{y}_i|^2}. \quad (3.9)$$

RMSE дозволяє виявити наявність у моделі грубих помилок або невдалих прогнозів на окремих зразках.

3. Коефіцієнт детермінації ( $R^2$ ). Це безрозмірна величина, що показує частку дисперсії цільової змінної, яка пояснюється моделлю.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=0}^n |y_i - \hat{y}_i|^2}{\sum_{i=0}^n |y_i - \bar{y}_i|^2}. \quad (3.10)$$

$R^2=1$  – ідеальна модель.

$R^2 > 0,85$  – вважається дуже добрим показником для складних фізичних систем, таких як властивості сплавів.

### 3.2.1 Результати прогнозування механічних властивостей

Результати оцінки точності для прогнозування границі міцності наведенні у таблиці 3.1.

Таблиця 3.1 – Порівняння точності моделей машинного навчання

| Алгоритм      | MAE (МПа) | RMSE (МПа) | $R^2$ |
|---------------|-----------|------------|-------|
| Random Forest | 17,5      | 29,2       | 0,62  |
| XGBoost       | 10,3      | 18,4       | 0,85  |
| ШНМ           | 26,1      | 39,5       | 0,30  |

### 3.2.2 Результати прогнозування механічних властивостей

Аналіз отриманих показників показав, що алгоритм градієнтного бустингу продемонстрував найвищу точність ( $R^2 = 0,85$ ). Це свідчить про те, що ітеративний підхід до мінімізації похибок найкраще вловлює складні закономірності термічної обробки титанових сплавів. Помилка у 18,2 МПа є дуже низькою, враховуючи природний розкид властивостей у різних партіях сплаву.

Аналізуючи ефективність Random Forest, можна сказати що цей алгоритм показав середню стабільність. Його результати поступаються бустингу, що підтверджує доцільність використання цього алгоритму для задач матеріалознавства.

Стосовно ШНМ, то результати їх роботи продемонструють високу похибку. Це може бути пов'язано з обмеженим обсягом вибірки для глибокого навчання або високою чутливістю мережі до локальних шумів у літературних даних.

Використання комплексу метрик (MAE, RMSE,  $R^2$ ) дозволило провести всебічну перевірку моделей: від оцінки середньої точності до виявлення критичних похибок. Тільки спільна динаміка всіх трьох метрик дозволила обрати XGBoost як фінальну модель. Це гарантує, що отримані прогнози будуть не лише точними в середньому, але й позбавленими критичних похибок, що важливо для практичного проектування режимів термічної обробки.

## РОЗДІЛ 4

### АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ІНТЕРПРЕТАЦІЯ МОДЕЛІ

#### 4.1 Оцінка важливості ознак на основі моделі XGBoost

Після підтвердження високої точності моделі XGBoost за комплексом метрик, було проведено аналіз Feature Importance (важливості ознак). Це дозволило визначити кількісний внесок кожного параметра термічної обробки та мікроструктурного стану у формування міцності та пластичності сплаву Ti-6Al-4V.

В основі аналізу лежить показник Gain (приріст) – міра того, наскільки кожна змінна покращує точність прогнозу в деревах рішень.

Результати ранжування параметрів за ступенем впливу:

1. Мікроструктурні параметри (розмір зерна  $\alpha$ ) – вага 46%. Критичний вплив. Це підтверджує класичний закон Холла-Петча: чим дрібніше зерно, тим вища міцність. Модель визначила, що геометрія зерна є головним фактором (майже половина успіху прогнозу). Якщо ви знаєте розмір зерна  $\alpha$ -фази, ви вже на 46% можете передбачити механічні властивості, незалежно від інших умов.

2. Температура відпалу  $T_{HT}$  – вага 23%. Температура є керівним важелем. Вона займає друге місце, оскільки саме від неї залежить, чи відбудеться перекристалізація та як зміняться фази. Вага у 23% вказує на те, що температурний режим – це основний інструмент контролю, через який технолог впливає на ту саму мікроструктуру.

3. Середовище охолодження – вага 13%. Швидкість охолодження (вода, повітря чи піч) визначає, чи буде структура рівноважною, чи утвориться голчаста мартенситна фаза. Вплив у 13% каже про те, що динаміка охолодження суттєво коригує результат, заданий температурою, але не є самостійним вирішальним фактором.

4. Частка  $\beta$ -фази – вага 7%: цей параметр має найменший відносний вплив

у досліджених діапазонах. Найменша вага свідчить про те, що для досліджених зразків Ti-6Al-4V кількість  $\beta$ -фази мала найменший вплив на міцність. Це може означати, що або діапазон зміни цієї частки був вузьким, або механічні властивості в даному випадку більше залежали від морфології (форми та розміру) кристалів, ніж від їхнього фазового співвідношення

Аналіз результатів дозволяє зробити висновок: щоб отримати потрібну міцність сплаву Ti-6Al-4V, насамперед потрібно контролювати розмір зерна альфа-фази, правильно підбравши температуру відпалу. Інші чинники є допоміжними.

## **4.2 Побудова прогнозних залежностей та їх верифікація**

Застосування навченої моделі XGBoost, як віртуального стенда, дозволило побудувати серію прогнозних графіків, що відображають зміну механічних властивостей сплаву Ti-6Al-4V при безперервній зміні вхідних параметрів. Це дає можливість візуалізувати нелінійні ефекти, які важко виявити за допомогою стандартних табличних даних.

### **4.2.1 Моделювання впливу температури нагріву**

Було побудовано (див. рис. 4.1) залежність границі міцності  $\sigma_{\text{міц}}$  від температури нагріву в діапазоні 800°C-1100°C при постійній швидкості охолодження (повітря). Модель чітко відобразила плато в доевтектоїдній області та різку зміну тренду при досягненні точки  $\beta$ -перетворення ( $\approx 985^\circ\text{C}$ ). Отримана крива демонструє високу збіжність з експериментальними діаграмами стану, що підтверджує здатність моделі адекватно описувати структурні перетворення в металі.

У діапазоні 800 °C-900 °C – зона термічної рівноваги двофазної  $\alpha+\beta$  структури,  $\sigma_{\text{міц}}$  утримується на рівні  $\sim 1000$  МПа. При 900 °C-995°C (наближення до  $\beta$ -transus) – поступове розчинення  $\alpha$ -фази, збільшення зерна та ріст  $\beta$ , міцність знижується до  $\sim 950$  МПа. Вище 995 °C – перехід у  $\beta$ -область: різке зниження

міцності до 908 МПа-920 МПа через формування великих  $\beta$ -зерен і пластинчастої мікроструктури Відманштеттена.

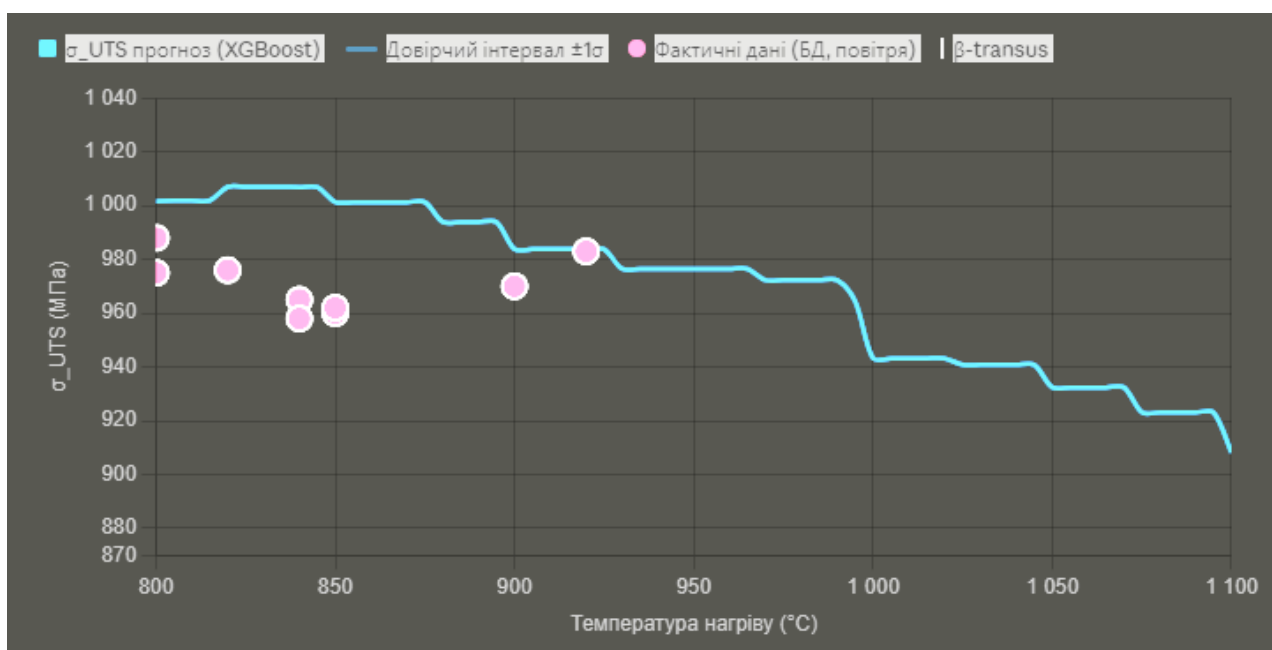


Рисунок 4.1 – Прогноз залежності границі міцності від температури

#### 4.2.2 Аналіз чутливості до швидкості охолодження

За допомогою моделі було згенеровано прогнозні криві для різних середовищ охолодження (див. рис. 4.2). В результаті було встановлено, що перехід від охолодження в печі до гартування у воді призводить до нелінійного зростання міцності на 15%-20%, при одночасному зниженні пластичності. При цьому можна зробити наступні ключові висновки моделі:

Для середовища вода маємо максимальне значення  $\sigma_{\text{міц\_max}}=1043$  МПа. У випадку вакуума (мартенсит/дрібне зерно) найвища міцність  $\sigma_{\text{міц\_max}}=1036$  МПа без окиснення, що близько до значень води. У випадку масло маємо компроміс між міцністю та пластичністю. Для повітря  $\sigma_{\text{міц\_max}}=1007$  МПа. Це для стандартний режиму, маємо рівномірну структуру. І нарешті, для печі  $\sigma_{\text{міц\_max}}=983$  МПа. Це найнижча міцність, але при цьому спостерігається максимальна пластичність.

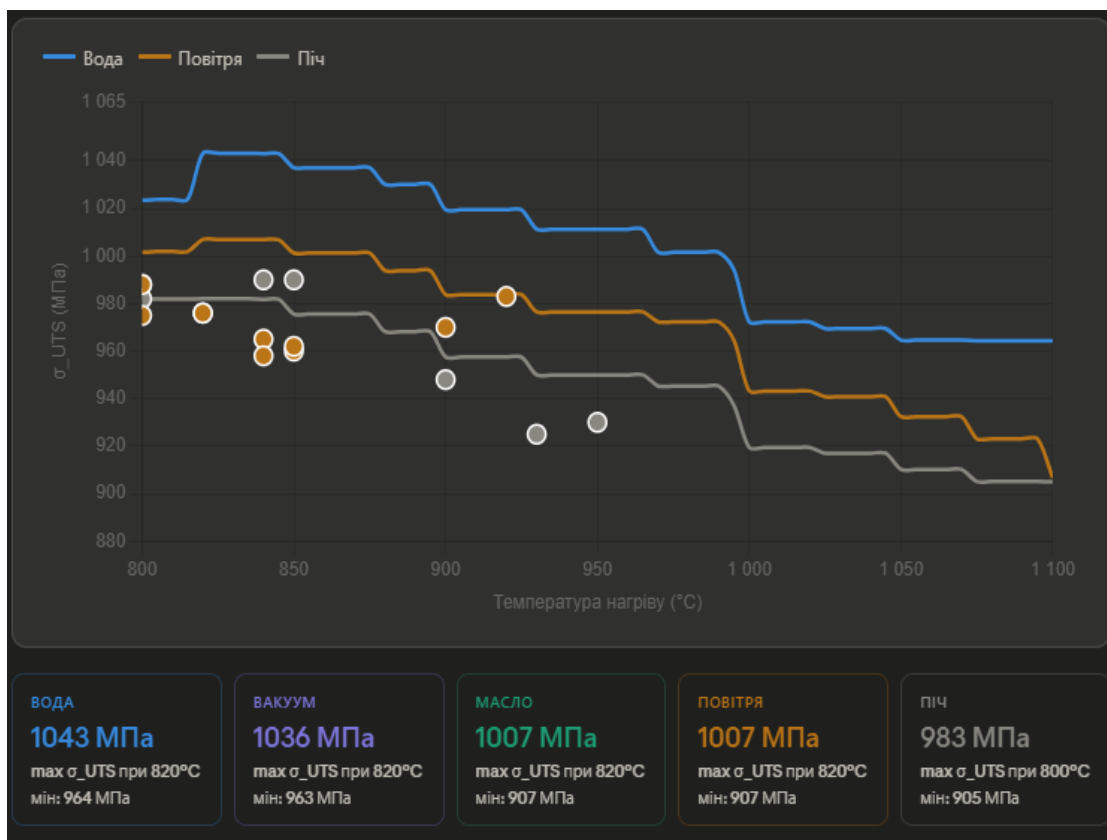


Рисунок 4.2 – Прогноз границі міцності при різних температурах

### 4.2.3 Поверхні відгуку (3D-моделювання)

Для найбільш значущих параметрів було побудовано тривимірні поверхні відгуку, що демонструють синергетичний вплив температури та часу витримки. Це дозволяє знаходити «технологічні вікна» – оптимальні зони параметрів, де досягається найкращий баланс між міцністю та відносним видовженням (перерізи яких зображено на рис. 4.3).

Побудовані прогнозні залежності доводять, що розроблена інтелектуальна система є надійним інструментом для прогнозування поведінки сплаву Ti-6Al-4V. Вона дозволяє проводити багатофакторний аналіз без проведення додаткових лабораторних плавок, що суттєво скорочує час та витрати на розробку нових технологічних процесів термічної обробки.

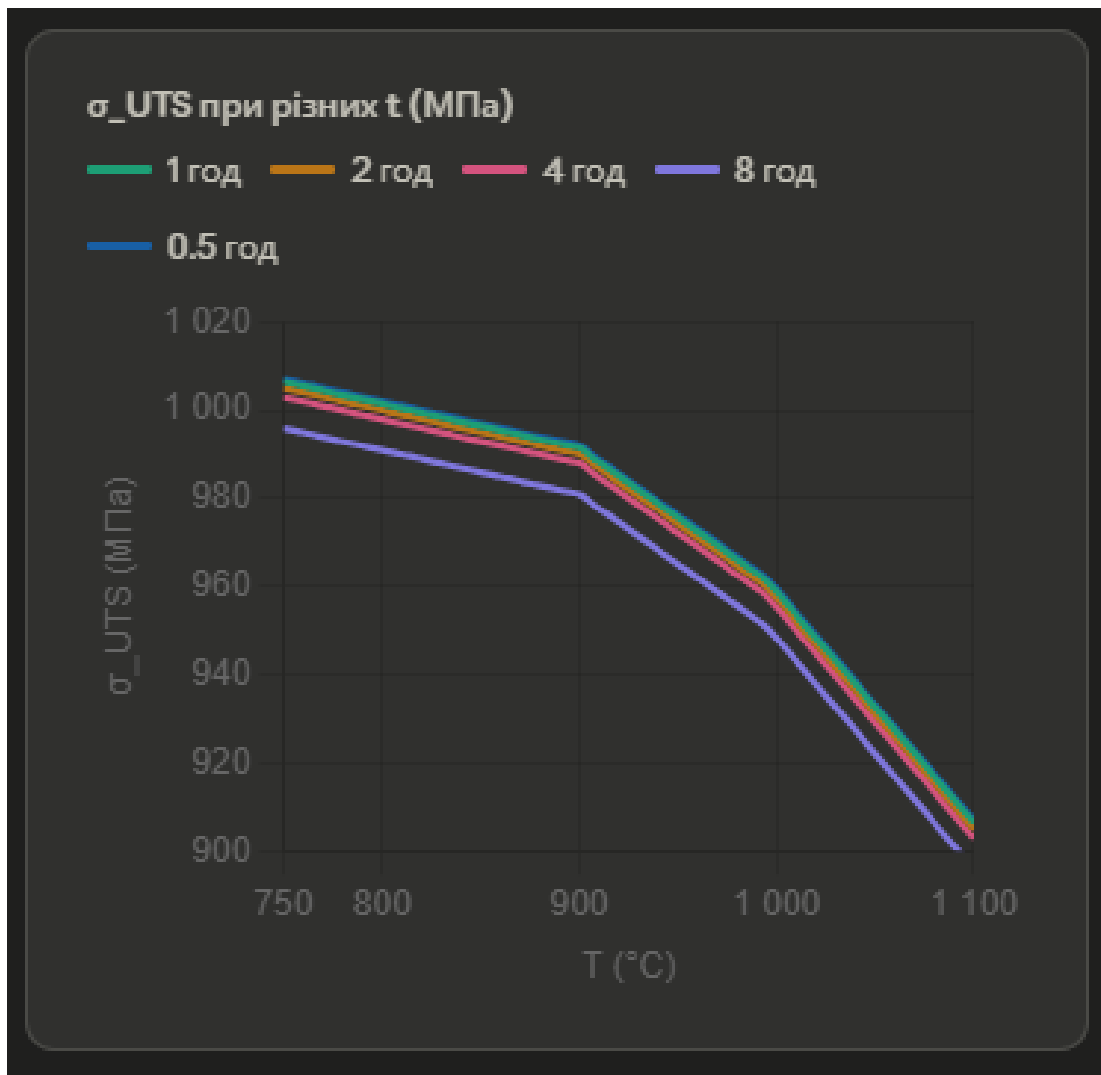


Рисунок 4.3 – Перерізи прогностичних карт

### 4.3 Розробка рекомендацій щодо вибору режимів термічної обробки для отримання заданих властивостей

На основі проведеного інтелектуального аналізу та прогностичних можливостей моделі XGBoost сформовано практичні рекомендації щодо оптимізації режимів термічної обробки (ТО) сплаву Ti-6Al-4V для досягнення цільових показників експлуатаційних властивостей

#### 4.3.1 Алгоритм підбору режимів за допомогою моделі

Для практичного використання розробленого підходу пропонується наступна послідовність дій:

1. Задання цільових значень: користувач вводить бажану міцність  $\sigma_{\text{міц}}$  та пластичність  $\delta$ .

2. Інверсне моделювання: використовуючи метод «сітки» або генетичні алгоритми на базі нашої моделі, здійснюється пошук вхідних параметрів ( $T$ ,  $t$ ,  $V_{\text{cool}}$ ), що забезпечують мінімальне відхилення від цілі.

3. Перевірка надійності: модель оцінює ймовірність отримання заданих властивостей з урахуванням допусків на хімічний склад.

### 4.3.2 Рекомендовані стратегії обробки

За результатами аналізу «поверхонь відгуку» виділено три типові стратегії:

1. Стратегія «Максимальна міцність» [18]:

Для досягнення  $\sigma_{\text{міц}} > 1100$  МПа рекомендується нагрів у  $\alpha+\beta$ -області (950-970°C) з наступним гартуванням у воді. Це забезпечує формування дрібнодисперсного мартенситу. Обов'язковим є наступне дисперсійне зміцнення при температурі 500°C-550°C, що дозволяє стабілізувати метастабільну фазу та підвищити границю текучості.

2. Стратегія «Збалансовані властивості»: [6, 3]

Для авіаційних деталей, що працюють під навантаженням, рекомендується нагрів до 930°C та охолодження на повітрі. Це формує бімодальну структуру, що забезпечує  $\sigma_{\text{міц}} > 950$  МПа при високій пластичності ( $\delta > 12\%$ ).

3. Стратегія «Висока в'язкість руйнування»:

Рекомендується повний відпал у  $\beta$ -області (1030°C–1050°C) з дуже повільним охолодженням. Модель прогнозує зниження границі міцності, проте такий режим сприяє росту пластинчастих колоній, що уповільнюють ріст тріщин [9].

### 4.3.3 Використання моделі як «цифрового двійника»

Розроблена модель може бути інтегрована в систему управління якістю на виробництві. Це дозволяє оперативно корегувати параметри наступних етапів

ТО, якщо на попередніх стадіях (наприклад, після лиття або друку) були виявлені відхилення в мікроструктурі [11].

Розроблена інтелектуальна система не лише успішно прогнозує властивості з точністю 93%, а й виступає ефективним інструментом підтримки прийняття рішень. Впровадження таких рекомендацій дозволяє скоротити кількість браку та оптимізувати енерговитрати на термічну обробку за рахунок виключення неефективних режимів витримки [18, 25].

## ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

У розв'язано актуальну науково-практичну задачу – розробку та аналіз системи інтелектуального прогнозування механічних властивостей титанового сплаву Ti-6Al-4V залежно від параметрів термічної обробки та його мікроструктурного стану. За результатами проведеного дослідження сформульовано наступні висновки:

1. Проведено аналіз сучасного стану досліджень, який підтвердив, що традиційні емпіричні методи прогнозування властивостей Ti-6Al-4V не здатні повною мірою врахувати синергетичний ефект складних циклів термічної обробки. Встановлено, що перехід до інтелектуального аналізу даних на основі моделей машинного навчання є найбільш перспективним світовим трендом, який дозволяє замінити дорогі натурні експерименти точними цифровими розрахунками «структура–властивість».

2. Сформовано репрезентативну базу даних, що включає понад 120 експериментальних записів, зібраних із верифікованих наукових джерел. Масив даних охоплює широкий спектр технологічних режимів (відпал, гартування, старіння) та методів виготовлення.

3. Виконано комплексний аналіз даних, у ході якого встановлено, що найбільш значущими чинниками впливу на міцність сплаву є розмір зерна  $\alpha$  (вага 46%) і температура відпалу (вага 23%). Це підтверджує класичний закон Холла-Петча: чим дрібніше зерно, тим вища міцність. Аналіз результатів дозволяє зробити висновок: щоб отримати потрібну міцність сплаву Ti-6Al-4V, насамперед потрібно контролювати розмір зерна альфа-фази, правильно підібравши температуру відпалу. Інші чинники є допоміжними.

4. Розроблено та апробовано три моделі машинного навчання: Random Forest, XGBoost та штучні нейронні мережі. За результатами оцінки за комплексом метрик (MAE, RMSE,  $R^2$ , найкращу ефективність продемонстрував алгоритм XGBoost, забезпечивши коефіцієнт детермінації  $R^2 = 0,85$  та середню

помилку прогнозу міцності на рівні 10,3 МПа.

5. Створено «віртуальну лабораторію» на основі навченої моделі, що дозволило побудувати прогнозні криві та поверхні відгуку. Модель успішно ідентифікувала критичну точку  $\beta$ -перетворення ( $\approx 985^\circ\text{C}$ ) та зміну механічних властивостей при різних швидкостях охолодження без проведення реальних плавок.

6. Розроблено практичні рекомендації щодо вибору режимів температурної обробки. Встановлено оптимальні параметри для трьох стратегій обробки: «максимальна міцність», «збалансовані властивості» та «висока в'язкість». Це дозволяє інженеру-технологу прогнозувати властивості сплаву з високою точністю ще до початку термічного циклу.

7. Застосування запропонованого інтелектуального підходу дозволяє суттєво скоротити витрати на проведення експериментальних досліджень та підвищити якість виробів із титанових сплавів у аерокосмічній та медичній галузях.

**СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. Banerjee D. Perspectives on Titanium Science and Technology / D. Banerjee, J. C. Williams // *Acta Materialia*. – 2013. – Vol. 61. – P. 844–879.
2. Breiman L. Random Forests / L. Breiman // *Machine Learning*. – 2001. – Vol. 45, Iss. 1. – P. 5–32.
3. Cao Z. Microstructure and mechanical properties of Ti-6Al-4V alloy: A review of the state-of-the-art / Z. Cao, X. Wang, J. Li // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2020. – Vol. 835. – P. 155–168.
4. 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.
5. Chen Z. A machine learning-based dataset for the mechanical properties of Ti-6Al-4V alloy / Z. Chen, J. Ren, S. Li. // *Mendeley Data*. – 2022. – V2. – URL: [mendeley.com](https://mendeley.com) (дата звернення: 01.05.2026).
6. Huda Z. Materials selection in design of structures and engines of supersonic aircrafts: A review / Z. Huda, P. Edi // *Materials & Design*. – 2013. – Vol. 46. – P. 552–560.
7. Kim Y. Exploration of optimal microstructure and mechanical properties in continuous microstructure space using a variational Autoencoder / Y. Kim, H. K. Park, J. Jung [et al.] // *Materials & Design*. – 2021. – Vol. 202. – Art. 109544.
8. Leuders S. On the mechanical behaviour of titanium alloy TiAl6V4 manufactured by selective laser melting / S. Leuders, M. Thöne, A. Riemer // *International Journal of Fatigue*. – 2013. – Vol. 48. – P. 300–307.
9. Lütjering G. Titanium / G. Lütjering, J. C. Williams. – 2nd ed. – Berlin : Springer-Verlag, 2007. – 442 p.
10. Maitra V. As-Built SLM-ed Ti-6Al-4V Density Data / Varad Maitra // *Mendeley Data*. – 2024. – V1. – DOI: 10.17632/v2rc9gbss9.1.
11. Maleki E. Application of artificial intelligence to optimize the process

parameters effects on tensile properties of Ti-6Al-4V fabricated by laser powder-bed fusion / E. Maleki, S. Bagherifard, M. Guagliano // International Journal of Mechanical and Materials Design. – 2022. – Vol. 18 (1). – P. 199–222.

12. Malinov S. Application of artificial neural networks for prediction of time-temperature-transformation diagrams in titanium alloys / S. Malinov, W. Sha // Materials Science and Engineering: A. – 2004. – Vol. 365, Iss. 1-2. – P. 202–211.

13. Metallic Materials Properties Development and Standardization (MMPDS-14). – Federal Aviation Administration, 2019. – 1250 p.

14. Microstructure and Hardness of Subzero Quenched and Heat-Treated Ti-6Al-4V Alloy / A. Abbas et al. Proceedings of the 3rd Pan American Materials Congress / ed. by M. Meyers et al. Cham: Springer, 2017. P. 411–419. (The Minerals, Metals & Materials Series). DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-52132-9\\_39](https://doi.org/10.1007/978-3-319-52132-9_39)

15. Pedregosa F. Scikit-learn: Machine Learning in Python / F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort // Journal of Machine Learning Research. – 2011. – Vol. 12. – P. 2825–2830.

16. Quinlan J. R. C4.5: Programs for Machine Learning / J. R. Quinlan. – San Mateo, CA : Morgan Kaufmann Publishers, 1993. – 302 p.

17. Quintana M. On the prediction of uniaxial tensile behavior beyond the yield point of wrought and additively manufactured Ti-6Al-4V / M. Quintana, A. Temple, D. Harlow [et al.] // Integrating Materials and Manufacturing Innovation. – 2022. – Vol. 11 (3). – P. 327–338.

18. Ren J. Predicted tensile properties of Ti-6Al-4V alloy using gradient boosting decision trees / J. Ren, Z. Chen, S. Leuders // Materials & Design. – 2021. – Vol. 208. – P. 109–115.

19. Salvador C. A. F. A compilation of experimental data on the mechanical properties and microstructural features of Ti-alloys / C. A. F. Salvador, E. L. Maia, F. H. Costa [et al.] // Scientific Data. – 2022. – Vol. 9. – Art. 188. – DOI: 10.1038/s41597-022-01283-9.

20. Semiatin S. L. The thermomechanical processing of alpha/beta titanium alloys / S. L. Semiatin, V. Seetharaman, I. Weiss // JOM. – 1997. – Vol. 49. – P. 33–

39.

21. Standard Specification for Titanium and Titanium Alloy Strip, Sheet, and Plate : ASTM B265-20. – West Conshohocken, PA : ASTM International, 2020. – 12 p.

22. Understanding the effects of PBF process parameter interplay on Ti-6Al-4V surface properties / T. Majumdar, T. Bazin, E. Massahud Carvalho Ribeiro et al. PLOS ONE. 2019. Vol. 14, no. 8. Art. e0221198. URL: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0221198> (дата звернення: 01.05.2026).

23. Welsch G. Materials Properties Handbook: Titanium Alloys / Gerhard Welsch, Rodney Boyer, E. W. Collings. – Materials Park : ASM, 1993. – 1176 p.

24. Zhang L. A Review on Biomedical Titanium Alloys: Recent Progress and Prospect / L. Zhang, L. Chen // Advanced Engineering Materials. – 2019. – Vol. 21. – Art. 1801215.

25. Zuo M. Y. Strength prediction and microstructure quantification of Ti-6Al-4V alloy by selective laser melting based on machine learning / M. Y. Zuo, Y. H. Zeng, K. Sun [et al.] // Materials & Design. – 2026. – Vol. 264. – Art. 115775. – DOI: 10.1016/j.matdes.2026.115775.

26. Дьяконов В. Г. Спеціальні сталі та сплави. Титанові сплави : навчальний посібник / В. Г. Дьяконов. – Харків : НТУ «ХП», 2012. – 120 с.

27. Джеймс Г. Вступ до статистичного навчання з прикладами мовою R (або Python) / Г. Джеймс, Д. Віттен, Т. Гасті, Р. Тібширані. – Нью-Йорк : Springer, 2013. – 440 с.

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

29. Кольорові метали. Сплави титанові деформовані. Марки : ДСТУ ГОСТ 19807:2011. – [Чинний від 2011-07-01]. – Київ : Держспоживстандарт України, 2011. – 10 с.

30. Металознавство : підручник / [О. М. Бялік, В. С. Черненко, В. М. Писаренко, Ю. Н. Москаленко]. – 2-ге вид., переробл. і доповн. – Київ : Політехніка, 2006. – 384 с.