

*Р. Р. ЛАВЩЕНКО, Г. І. ЛЬВОВ*

## ОГЛЯД ЗАСТОСУВАНЬ DATA-DRIVEN ПІДХОДУ ДЛЯ АНАЛІЗУ ТЕПЛО-ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТИВ

У статті представлено аналіз можливостей та перспектив data-driven підходу для вивчення термофізичних властивостей композитних матеріалів. Дослідження має на меті надати огляд потенціалу та переваг використання data-driven методологій, особливо в порівнянні з традиційними методами. Протягом аналізу розглядаються ключові концепції та передові методи машинного навчання, які зазвичай застосовуються в матеріалознавстві, підкреслюючи їх здатність покращувати розуміння, оптимізацію та загальну якість композитних матеріалів. Використання нейронних мереж для прогнозування теплових характеристик досліджується в деталях, демонструючи їх прогностичні можливості та потенціал для революціонізації вивчення теплових властивостей композитних матеріалів. Проводиться порівняльна оцінка між data-driven підходом та традиційними аналітичними техніками, підкреслюючи унікальні переваги та обмеження обох. Це порівняння дає уявлення про те, як data-driven методи можуть спростити та покращити точність термофізичного аналізу. Крім того, у статті описуються сучасні методи вимірювання та прогнозування термофізичних параметрів композитів, зосереджуючи увагу на тому, як новітні технології розвивалися в останні роки. Далі обговорюється роль обчислювальних інструментів та комп'ютерних технологій, зокрема в моделюванні термофізичних властивостей та симуляції процесів виробництва композитних матеріалів. Ця стаття підкреслює зростаючу значущість цих технологій у розвитку як теоретичних, так і практичних аспектів матеріалознавства. Пропонуючи нові погляди на виробництво композитів, дослідження сприяє подальшому розвитку як матеріалознавства, так і промислових застосувань композитів. Ці результати мають більш широкі наслідки для покращення виробничих процесів, стимулювання інновацій та розвитку досліджень композитних матеріалів у різних галузях.

**Ключові слова:** data-driven підхід, композити, термофізичні властивості, аналіз даних, прогнозування.

The paper presents an analysis of the possibilities and prospects of a data-driven approach for studying the thermo-physical properties of composite materials. The research aims to offer an overview of the potential and advantages of utilizing data-driven methodologies, particularly in comparison to traditional methods. Throughout the analysis, key concepts and advanced machine learning techniques commonly applied in materials science are examined, emphasizing their capacity to enhance the understanding, optimization, and overall quality of composite materials. The use of neural networks for predicting thermal characteristics is explored in depth, showcasing their predictive capabilities and potential for revolutionizing the study of thermal properties in composite materials. A comparative evaluation is conducted between the data-driven approach and conventional analysis techniques, highlighting the unique benefits and limitations of both. This comparison provides insights into how data-driven methods can streamline and improve the accuracy of thermo-physical analysis. Additionally, the paper describes modern methods of measuring and predicting the thermo-physical parameters of composites, focusing on how emerging technologies have evolved in recent years. The role of computational tools and computer technologies is further discussed, particularly in modeling the thermo-physical properties and simulating the manufacturing processes of composite materials. This paper underscores the increasing relevance of these technologies in advancing both theoretical and practical aspects of material science. By offering new insights into composite production, the research contributes to the future development of both materials science and the industrial applications of composite materials. The findings have broader implications for improving manufacturing processes, driving innovation, and advancing the study of composite materials in various industries.

**Key words:** data-driven approach, composites, thermo-physical properties, data analysis, prediction.

**Вступ.** Тепло-фізичні властивості композитів визначають їхню здатність передавати, вивільнювати та проводити тепло, визначаючи, таким чином, їхню ефективність у різноманітних технічних та інженерних застосуваннях. Ці властивості включають теплопровідність, теплоємність, коефіцієнт теплового розширення та інші, які грають ключову роль у процесах теплопередачі та аналізі напруженого стану елементів конструкцій. Композитні матеріали, що складаються з двох або більше компонентів з різними фізичними властивостями, створюють складний ландшафт для вивчення тепло-фізичних явищ. На відміну від гомогенних матеріалів теплопровідність та температурне розширення характеризується не скалярними параметрами, а тензорами другого рангу. Проведення прямих фізичних експериментів для визначення усіх компонентів цих тензорів не завжди можливе або не доцільне. Теоретичне прогнозування фізичних властивостей композитів у багатьох випадках є більш ефективнішим.

З розвитком нових матеріалів і технологій дослідження тепло-фізичних властивостей стає все важливішою задачею у науці та інженерії матеріалів. При цьому важливою є не лише сама точність вимірювань, а й ефективність процесів аналізу даних. У зв'язку з цим з'являється необхідність вдосконалення методів обробки інформації, що

виявляється особливо актуальним у контексті використання data-driven підходу [1].

В останні десятиліття зростає інтерес до використання data-driven підходів у наукових та інженерних дослідженнях, включаючи аналіз матеріалів. Data-driven підхід полягає в використанні алгоритмів машинного навчання та інших методів обробки даних для виявлення закономірностей, тенденцій та прогнозування результатів на основі великих обсягів даних [2]. Це відкриває нові перспективи для вдосконалення точності та ефективності аналізу тепло-фізичних властивостей композитів.

У порівнянні з традиційними методами дослідження, які можуть бути часомісткими та витратними, data-driven підхід дозволяє автоматизувати процес аналізу, швидко визначати складні зв'язки та робити прогнози на основі існуючих даних. Це особливо важливо в сучасному науковому середовищі, де збільшення обсягу даних вимагає нових підходів до їхнього аналізу та інтерпретації.

Аналіз тепло-фізичних властивостей композитів за допомогою data-driven підходу може призвести до виявлення нових закономірностей та вдосконалення методів прогнозування. Такий підхід відкриває двері для більш точного розуміння теплових процесів у складних матеріалах і сприяє розвитку інноваційних

технологій в галузі матеріалознавства та інженерії. У даному літературному огляді ми розглянемо ключові аспекти використання data-driven підходу для аналізу тепло-фізичних властивостей композитів, зосереджуючись на сучасних дослідженнях та важливих висновках, що можуть визначити подальший напрямок розвитку в цій області.

**Основні принципи data-driven аналізу в матеріалознавстві.** Data-driven аналіз у матеріалознавстві представляє собою інноваційний підхід до вивчення та оптимізації властивостей матеріалів. Огляд основних понять цього підходу є важливим для розуміння його принципів та потенціалу в наукових та інженерних дослідженнях. Це поняття передбачає використання аналітичних та статистичних методів для отримання знань із великої кількості даних. Data-driven аналіз дозволяє виявляти складні зв'язки та закономірності, що можуть залишатися прихованими в традиційних методах [1].

У матеріалознавстві, де велика кількість експериментальних та обчислювальних даних стає стандартом, використання методів обробки великих обсягів даних є ключовим елементом. Вони дозволяють аналізувати та визначати закономірності в масивах інформації [3]. Data-driven аналіз в матеріалознавстві використовує методи кластеризації для групування подібних матеріалів та класифікації для присвоєння їм конкретних категорій. Це полегшує розуміння структурних та властивісних розбіжностей між різними матеріалами [2]. Використання візуалізації стає ефективним способом представлення складних даних. Data-driven аналіз включає в себе використання графіків для надання наочності результатам аналізу [4]. Застосування регресійного аналізу у data-driven підходах сприяє визначенню залежностей між різними параметрами матеріалів, що дозволяє прогнозувати їхні властивості та поведінку в різних умовах.

Машинне навчання в матеріалознавстві визначається використанням алгоритмів та моделей, які можуть адаптуватися та вдосконалюватися на основі даних. Застосування методів машинного навчання є ключовим елементом data-driven аналізу в матеріалознавстві. Машинне навчання в матеріалознавстві [5] охоплює як методи навчання з вчителем, де модель вивчається на основі пар вхід-вихід, так і методи навчання без вчителя, де алгоритми аналізують дані без чіткого навчального набору. Машинне навчання в матеріалознавстві дозволяє автоматизувати обробку та аналіз великих обсягів даних. Алгоритми можуть швидко виявляти складні взаємозв'язки та побудовувати прогностичні моделі [3]. Застосування методів машинного навчання дозволяє точно прогнозувати тепло-фізичні властивості матеріалів на основі існуючих даних, враховуючи різноманітні параметри [2]. Машинне навчання дозволяє ефективно аналізувати не лише тепло-фізичні, але і інші параметри матеріалів, такі як структура та склад. Це сприяє глибшому розумінню взаємозв'язків у матеріалознавстві.

Цей огляд основних принципів data-driven аналізу та застосування методів машинного навчання в матеріалознавстві свідчить про потенціал цих підходів для вивчення та оптимізації властивостей композитів. Надзвичайно важливо продовжити дослідження в цьому напрямку для досягнення нових наукових відкриттів та технологічних переваг у розробці матеріалів.

**Тепло-фізичні властивості композитів та їх вимірювання і прогнозування.** Тепло-фізичні властивості композитів є ключовим аспектом їхньої поведінки та функціональності в різноманітних умовах експлуатації. Огляд основних тепло-фізичних параметрів стає важливою передумовою для розуміння та контролю теплових процесів в композитних матеріалах.

Теплопровідність є однією з ключових характеристик, яка визначає здатність матеріалу передавати тепло. У композитах ця властивість залежить від типу та кількості компонентів, їхньої мікроструктури та взаємодій між ними. [3] Особливості теплопровідності в композитах можуть призводити до неочікуваних ефектів та варіацій у порівнянні з однорідними матеріалами.

Теплоємність вказує на здатність матеріалу поглиблювати тепло при зміні температури. У композитах ця властивість визначається масовими вмістами та теплоємністю кожної компоненти. Зміна теплоємності може виникати через фазові переходи або інші термодинамічні взаємодії в системі.

Коефіцієнт теплового розширення визначає, наскільки змінюється розмір матеріалу при зміні температури. У композитах ця властивість може варіюватися в залежності від напрямку та взаємного розташування компонентів.

Окрім основних тепло-фізичних параметрів, важливо враховувати термічну стабільність та витривалість композитів при екстремальних температурах. Зміни у мікроструктурі та хімічному складі можуть впливати на довговічність та ефективність композитних матеріалів у високотемпературних умовах [4].

У реальних умовах експлуатації композити можуть піддаватися впливу вологості, хімічних речовин, агресивних середовищ та інших факторів. Врахування цих аспектів є ключовим для повного розуміння тепло-фізичної поведінки композитів.

Сукупність термофізичних властивостей композитів має визначальне значення як у технологічних процесах створення матеріалу, так і виробу. Прикладом такого процесу є пултрузія, яка була досліджена у роботі [6].

Процес пултрузії представляє собою один із ключових методів виготовлення композитних матеріалів з постійним поперечним перерізом. Важливо враховувати теплофізичні параметри у контексті цього технологічного процесу. Дослідження виробництва композитів через пултрузію надає важливі відомості про температурні умови та профілі затвердіння [7]. Однак для повноцінного розуміння теплофізичної поведінки композитів необхідно

розглядати основні параметри, такі як теплопровідність, теплоємність, коефіцієнт теплового розширення та інші характеристики, які визначають їхню теплову взаємодію та функціональність в різних умовах експлуатації.

Також експериментально досліджувалися процеси пултрузії для різних одновісних композитних профілів [8–10]. У цих дослідженнях температури вимірювалися за допомогою термопар всередині композиту.

Поряд із експериментальними методами визначення цих параметрів, теоретичне прогнозування стає невід'ємною частиною досліджень. Особливо важливим стає використання сучасних комп'ютерних технологій для моделювання та аналізу теплофізичних властивостей композитів [11]. Велика кількість даних, отриманих експериментально, сприяє розвитку нових теоретичних моделей, які дозволяють прогнозувати властивості композитів при різних умовах та складах. Особливий акцент на використанні сучасних обчислювальних методів створює можливості для точного прогнозування та оптимізації тепло-фізичних властивостей композитів у широкому спектрі застосувань.

У роботі [12] було розроблено два підходи до кінцево-елементного моделювання з використанням безперервної моделі з концентрованими властивостями матеріалу для твердого композиту з метою визначення характеристик процесів пултрузії в реальному часі зі складним контролем температури. Обидва підходи базуються на схемі змішаної інтеграції часу та методі вузлових контрольних об'ємів. Однак, важливо відзначити, що в цьому контексті результати дослідження зорієнтовані на тепло-фізичні параметри композитів.

Крім того, в роботі [12] використовувалася безперервна модель із зосередженими властивостями матеріалу для затвердлого композиту. Температури вимірювалися за допомогою термопар всередині композиту, а їх контроль був значущим етапом у виробництві для забезпечення відповідних теплофізичних характеристик.

У дослідженні [13] детально розглядається виробництво та механічні характеристики волоконно-епоксидних композитів із використанням хімічно модифікованих епоксидних смол на основі сої. Під час виробництва композитів шляхом пултрузії використовували системи спільної смоли з вмістом соєвих смол до 30 мас.%. Механічні випробування підтверджують, що пултрузійні композити з системами співсмоли на основі сої мають порівняні або покращені структурні характеристики, такі як міцність на вигин, модуль і ударостійкість.

Сучасний розвиток матеріалознавства та обчислювальної техніки дозволяє використовувати ефективні методи для прогнозування теплофізичних властивостей композитів, що відкриває нові перспективи для їхнього вдосконалення та широкого використання. Методи прогнозування теплопровідності та температурного розширення стають ключовими в аспекті проектування матеріалів

для конкретних технологічних завдань та умов експлуатації.

Однією з передових областей є використання методів молекулярно-динамічного моделювання для прогнозування теплофізичних властивостей композитів на молекулярному рівні. Ці методи дозволяють вивчати рух атомів та молекул, що важливо для розуміння теплопередачі та ефективності матеріалу.

Використання обчислювальних методів та матеріалознавчих баз даних дозволяє прогнозувати теплопровідність та температурне розширення на основі властивостей окремих компонентів композиту. Інтеграція цих даних може бути використана для покращення прогнозів для складних композитних систем [14].

Застосування методів штучного інтелекту (ШІ) та машинного навчання для аналізу теплофізичних властивостей композитів стає все більш популярним. Моделі ШІ можуть аналізувати великі обсяги даних та визначати складні зв'язки між різними параметрами, що важливо для точного прогнозування [2].

Комп'ютерне моделювання структури композитів дозволяє враховувати різноманітні фактори, такі як розташування волокон, пористість, архітектура матеріалу тощо. Це дає можливість прогнозувати теплопровідність та температурне розширення в залежності від геометричних та хімічних характеристик. [4]

У роботі [15] представлена методика кількісного визначення нелінійної невизначеності та поширення на основі даних для вивчення стохастичних характеристик однонаправлених (UD) полімерних (CFRP) композитів, посиленних вуглецевим волокном. Запропонований підхід об'єднує характеристику мікроскопічного зображення, стохастичну реконструкцію мікроструктури та ефективне багатомасштабне моделювання методом кінцевих елементів, що забезпечується аналізом самоузгодженої кластеризації (SCA). Для моделювання складної мікроструктурної змінності запропоновані методи UQ враховують негаусівські джерела невизначеності за допомогою підходу вибірки без розподілу, що використовує непараметричні та асимптотичні статистичні інструменти. Ієрархічна умовна стратегія вибірки дозволяє одночасно вибирати з кількох джерел невизначеності. Цей підхід дає змогу зрозуміти вплив мікроструктурних змін, які мають все більше впливу на нелінійні відгуки деталей з вуглепластику UD під дією прогресивного навантаження від стискання та, в кінцевому рахунку, на частоту відмов з часом. Визначення періоду часу відмови має вирішальне значення для прогнозування надійності, що є важливим компонентом конструкції CFRP.

У статті [16] проведено дослідження щодо доцільності застосування методів прогнозування теплопровідності та температурного розширення для автомобільного краш-боксу (crash box) на основі даних, отриманих під час характеристики будівельного блоку. Автомобільний краш-бокс (crash

box) - це компонент автомобіля, який призначений для поглинання енергії під час аварійного зіткнення. Загальна ефективність краш-боксу була проаналізована для різних товщин і швидкостей тестування. Головний висновок полягає в тому, що при однаковій товщині та швидкості тестування питоме поглинання енергії (SEA) та значення пікового навантаження подібні для будівельного блоку та краш-боксу. Таким чином, можливо використовувати методи прогнозування теплопровідності та температурного розширення для оцінки дизайну складної конструкції, спрощуючи процедуру тестування. Проте важливо приділяти особливу увагу швидкості тестування, оскільки відсоток зламаних волокон може змінюватися в залежності від неї в квазістатичних умовах.

Інтеграція експериментальних даних з обчислювальними методами стає ефективним засобом прогнозування. Цей підхід дозволяє уточнювати моделі на основі реальних даних, отриманих з експериментів, що полегшує створення точних прогнозів [2]. Альтернативою чисто експериментальним методам вимірювання термofізичних властивостей композитів є теоретичне передбачення цих властивостей на основі відомих властивостей складових структури. У роботі [17] представлена комплексна числова методика, яка дозволяє з єдиної позиції та за допомогою єдиного програмного забезпечення визначати компоненти тензорів теплопровідності та температурного розширення волокнистих композитів. У роботі [18] запропонована методика визначення ефективних характеристик теплопровідності композитів з періодичною структурою, з довільною кількістю фаз та будь-якою формою включень. Процедура базується на використанні рядів Фур'є для подання періодично змінюючихся полів температур і теплових потоків. Теоретична оцінка модулів пружності та коефіцієнтів температурного розширення виконана в роботі [19] з використанням моделей Морі—Танака для випадку регулярного упакування волокон із еліпсоїдальним поперечним перерізом. Багаторівневе моделювання теплового розширення композитів із карбідокремніевою матрицею, армованих вуглецевими волокнами, виконано в роботі [20] з урахуванням пористості кераміки.

У роботі [21] проведено гомогенізацію властивостей матеріалу кераміки за допомогою двопараметричного підходу Ешелбі-Морі-Танака (EMT). Залежність властивостей кераміки від температури описана гладкою зміною об'ємної частки вуглецевих нанотрубок за допомогою сигмоїдальної функції, профілю-О або профілю-Х. Для аналізу термомеханічної задачі із одностороннім зв'язком використовується чисельне розв'язання нелінійного рівняння теплопровідності методом узагальненої диференціальної квадратури (GDQM), а також лінійної механічної задачі за допомогою теорії зсувної деформації третього порядку Редді (TSDT) і GDQM. Вплив фактора агрегації визначено за його впливом на

максимальну поперечну нормаль і максимальні кільцеві напруження в циліндрі.

У статті [22] досліджується експериментальний підхід з багато масштабним підходом, спрямований на встановлення кореляції між глобальним напруженням та локальною реакцією матеріалу в масштабі волокна. З використанням оптичної цифрової кореляції зображень з високою роздільною здатністю визначаються зони низької та високої деформації в тканих композитних зразках, які навантажуються одноосним натягом. Кількісно визначені відповідні деформації повного поля використовуються для встановлення зв'язку між глобальною та локальною поведінкою деформації як функції орієнтації волокон. Крім того, аналізуються криві глобального напруження - локальної деформації для зразків з різними кутами орієнтації волокон. Залежність глобального напруження від локально розвиненої деформації в поєднанні з моделлю пластичності дозволяє розробити феноменологічну модель, яка враховує глобальні та локальні аспекти деформації в композитних зразках, що піддаються поза осьовому навантаженню розтягування.

У дослідженні [23] була розроблена тривимірною багато масштабна кінцево-елементна модель для прогнозування ефективної теплопровідності композитів CNT/Al. Детально досліджено вплив конфігурації CNT, напрямку теплопередачі, міжфазного теплового опору та об'ємної частки. Створено п'ять конфігурацій CNT, включаючи випадково розташовані, рівномірно орієнтовані, багатосарові, об'єднані та мережеві. Результати підтверджують, що конфігурація CNT важлива для ефективної теплопровідності композитів CNT/Al, а поверхня розділу та напрямок теплового навантаження також суттєво впливають на теплопровідність композитів.

Узагальнюючи, сучасні методи прогнозування теплофізичних властивостей композитів використовують широкий спектр підходів, починаючи від атомних моделей та закінчуючи комплексними експериментально-обчислювальними методами. Це дозволяє науковцям не лише розуміти тепло-фізичні властивості композитів, але і ефективно впливати на них для досягнення оптимальних характеристик у конкретних застосуваннях.

**Застосування data-driven підходу для аналізу тепло-фізичних властивостей композитів.** В сучасному світі, де обсяги даних непереджено зростають, а наукові дослідження стають все більш високотехнологічними, використання data-driven підходу в матеріалознавстві визнається однією з перспективних стратегій для вивчення тепло-фізичних властивостей композитів. У цьому розділі ми детально розглянемо важливі аспекти використання data-driven методів для аналізу тепло-фізичних характеристик композитних матеріалів.

У сучасному матеріалознавстві використання нейронних мереж виявляється потужним інструментом для прогнозування теплових характеристик композитів [5]. Нейронні мережі, які

імітують роботу нейронної системи людини, стають важливим компонентом data-driven підходу, надаючи можливість аналізу та прогнозування теплових властивостей матеріалів без прямого задання фізичних рівнянь [1, 6].

Нейронні мережі - це моделі, які намагаються відтворити взаємодію між нейронами в мозку [3, 5]. Вони складаються зі шарів нейронів, де кожен нейрон пов'язаний з іншими за допомогою зважених з'єднань. Основна ідея полягає в тому, що мережа може вивчати складні залежності між вхідними та вихідними даними.

Одним із ключових аспектів дослідження теплофізичних властивостей композитів є прогнозування їхньої теплопровідності. Нейронні мережі здатні адаптуватися до складних нелінійних залежностей та виявляються ефективними для моделювання теплопередачі у композитних матеріалах [10, 14].

В розробці нейронних мереж важливо обрати відповідну архітектуру. У матеріалознавстві використовуються різноманітні архітектури, включаючи звичайні шарові мережі, рекурентні мережі для аналізу послідовностей та глибокі мережі для більш складних завдань [2].

Збір великих обсягів експериментальних даних є критичним для успішного тренування нейронних мереж. Точність та ефективність моделі нейронної мережі напряму залежать від якості та репрезентативності навчального набору [24].

Використання нейронних мереж має свої переваги та обмеження. До переваг відносяться здатність вивчати складні залежності та робота з великими обсягами даних. Однак обмеження включають потребу у великій кількості даних для тренування та виклики у поясненні результатів моделі [3].

Загально кажучи, використання нейронних мереж у прогнозуванні теплових характеристик композитів відкриває нові горизонти у вивченні матеріалів [24]. Цей підхід виявляється особливо ефективним у тих випадках, де традиційні методи аналізу не забезпечують необхідної точності або коли маємо справу з великою кількістю даних.

Порівнювати data-driven підхід із традиційними методами аналізу теплофізичних властивостей композитів стає актуальним завданням у сучасному матеріалознавстві. Традиційні методи, які базуються на фізичних моделях та експериментальних вимірюваннях, та новітні підходи data-driven, використовуючи методи машинного навчання та аналізу великого обсягу даних, представляють різні підходи до вивчення та оптимізації теплофізичних властивостей композитних матеріалів.

Традиційний підхід включає в себе експериментальні методи вимірювання теплофізичних властивостей, такі як теплопровідність та температурне розширення [14]. Застосування теоретичних моделей, таких як модель сумісності та теорія макроскопічної моделі, є звичайним для прогнозування поведінки композитів. Традиційні методи забезпечують високу точність в ряді випадків,

але можуть бути обмежені складністю вимірювань та високою вартістю експериментів.

Data-driven підхід використовується для виявлення складних залежностей між теплофізичними властивостями [2]. Машинне навчання, нейронні мережі та аналіз великого обсягу даних стають інструментами для розкриття патернів та прогнозування властивостей композитів без прямих фізичних моделей. Вони можуть бути особливо корисними в умовах, де традиційні методи можуть бути важкодоступними або дорогими.

Традиційні методи можуть забезпечувати високу точність для конкретних умов експлуатації та матеріалів. З іншого боку, data-driven методи, завдяки їхній здатності пристосовуватися до складних взаємозв'язків у великих наборах даних, можуть виявитися більш універсальними, але можуть вимагати великої кількості тренувальних даних для досягнення оптимальної точності [3].

Data-driven методи можуть виявити себе менш чутливими до варіацій у вихідних даних і умовах експлуатації порівняно з традиційними методами, оскільки вони спроможні враховувати неочікувані або складні закономірності, які можуть бути неврахованими у традиційних моделях.

Data-driven методи можуть виявити себе більш гнучкими для прогнозування теплофізичних властивостей у нових умовах та з новими матеріалами, оскільки вони здатні адаптуватися до нових патернів, якщо наявні відповідні дані [25].

Традиційні методи можуть бути витратними та часомісткими, особливо при великому обсязі експериментів. З іншого боку, data-driven підхід може бути більш доступним і ефективним, особливо якщо є велика кількість вже наявних даних для аналізу [26].

У статті [27] пропонується ефективна макро-мікро модель для прогнозування теплофізичних властивостей композитів, які армуються короткими волокнами, включаючи нелінійну пластичну поведінку. На мікроскопічному рівні використовується остання мікромеханічна модель, розроблена на основі двоетапного усереднення орієнтації. Ця модель може враховувати широкий спектр мікроструктурних параметрів, таких як конститутивні параметри матриці та волокна, об'ємна частка волокна та співвідношення сторін волокна. Різні взаємодії, включаючи моделі Фойгта, Рейса та самоспрямовані припущення, розглядаються в мікромеханічній моделі. Після цього цю мікромеханічну модель включають в модель скінченних елементів для макроскопічного моделювання реальних структур та зразків композитів.

Цей підхід до аналізу теплофізичних властивостей композитів акцентує увагу на розробці багатомасштабної моделі, що об'єднує мікро- та макроаспекти. Порівнюючи його з традиційними методами, такими як експерименти та фізичні моделі, а також новітніми data-driven підходами, що використовують машинне навчання та аналіз великих обсягів даних, можна виявити переваги та особливості

кожного підходу. Обговорюються точність результатів, їх універсальність, чутливість до вхідних даних та умов експлуатації, а також прогностичні можливості кожного методу в контексті оптимізації теплофізичних властивостей композитів.

У статті [28] досліджено вплив мікроструктурних параметрів на макромеханічні характеристики коротковолокнистих композитів, армованих короткими волокнами. Запропонована методологія моделювання враховує різноманіття цих параметрів, таких як об'ємна частка волокон, аспекти співвідношення волокон та розподіли орієнтації волокон. Описана мікромеханічна модель, розроблена за допомогою аналізу кінцевих елементів та орієнтаційного усереднення, може бути застосована для прогнозування теплофізичних властивостей композитів. Порівнюючи з традиційними методами та сучасними підходами data-driven, робиться акцент на важливості врахування мікроструктурних параметрів при аналізі та оптимізації властивостей композитів.

У роботі [29] представлена нова мікромеханічна модель для прогнозування нелінійної пружно-пластичної поведінки композитів, армованих короткими волокнами. Модель розроблена на основі двохетапного методу орієнтаційного усереднення і здатна враховувати широкий спектр мікроструктурних параметрів. На першому етапі аналіз кінцевих елементів виконується на елементарній комірці (окреме волокно, оточене матрицею). Потім відповідь елементарної комірки збільшується шляхом калібрування її реакції на пружно-пластичну сурогатну конститутивну модель. На наступному другому етапі гомогенізації пропонується схема самоузгодженої взаємодії. Потім оцінюється передбачувана здатність отриманої двохетапної схеми гомогенізації разом із версіями, які використовують більш традиційні схеми усереднення (Фойгта та Рейса, що забезпечують верхню та нижню межі відповідно), шляхом порівняння з експериментами та прямим числовим моделюванням реалістичного репрезентативного об'єму елементів.

У порівняльному аналізі традиційних та data-driven методів важливо враховувати їхні переваги та обмеження, а також конкретні умови та завдання дослідження. Обидва підходи мають своє місце в науковому дослідженні тепло-фізичних властивостей композитів, і їх взаємодія може призвести до нових відкриттів та покращень у матеріалознавстві.

**Висновки.** У даній роботі було проведено огляд використання data-driven підходу в аналізі тепло-фізичних властивостей композитних матеріалів. Результати досліджень вказують на значний внесок цього підходу у розвиток сучасного матеріалознавства та його застосування для прогнозування теплових характеристик композитів.

Використання нейронних мереж виявилось дуже ефективним для прогнозування теплопровідності композитів. Машинне навчання дозволило створити моделі, які здатні адаптуватися до складних теплових процесів та враховувати нелінійні взаємозв'язки між різними параметрами матеріалів.

В дослідженнях було виявлено, що вибір відповідної архітектури нейронної мережі грає ключову роль у точності та універсальності моделі. Різноманітні архітектури, такі як рекурентні та глибокі мережі, використовуються залежно від конкретних властивостей матеріалів та поставленої задачі.

Аналіз великого обсягу даних виявився критичним етапом у вивченні тепло-фізичних властивостей. Використання статистичних методів, машинного навчання та обчислювальних методів дозволило отримати більш точні результати та глибше розуміння закономірностей у тепловіддачі та інших параметрах.

В порівнянні з традиційними методами, data-driven підхід дозволяє отримати більш універсальні та гнучкі моделі. Точність таких моделей залежить від наявності великої кількості даних, проте їхні можливості в прогнозуванні виявляються значно більшими у ряді умов. Використання data-driven методів зменшує чутливість до варіацій у вихідних даних та умовах експлуатації. Це робить їх ефективними інструментами для прогнозування поведінки матеріалів у різних умовах.

Результати досліджень свідчать про значні перспективи використання data-driven підходу у подальших дослідженнях тепло-фізичних властивостей композитів, і дозволяють визначити напрямки для майбутніх розвідок та розвитку цього підходу.

Розширення досліджень на мультиматеріалові системи та композити з різних матеріалів може стати одним із ключових напрямків. Data-driven методи мають потенціал для моделювання тепло-фізичних властивостей при різних комбінаціях матеріалів. Подальший розвиток data-driven підходів може бути спрямованим на оптимізацію тепло-фізичних властивостей композитів. Використання алгоритмів машинного навчання для автоматизованого пошуку оптимальних конфігурацій матеріалів може полегшити і прискорити процес проектування. Поліпшення взаємодії data-driven моделей з експериментальними дослідженнями стане важливим кроком у забезпеченні точності та перевірки результатів. Це дозволить підтверджувати та доповнювати виведені з моделей даними з реальних вимірювань. Data-driven підхід може бути успішно використаний в інших галузях, таких як енергетика, медицина чи авіаційна промисловість. Адаптація та розширення моделей для різних областей може привести до нових застосувань та відкриттів. Глибше вивчення впливу мікроструктури на тепло-фізичні властивості композитів може стати актуальним напрямком. Data-driven методи можуть допомогти в ідентифікації та моделюванні цих складних зв'язків. Створення відкритих баз даних та стандартизація підходів до обробки даних можуть сприяти розвитку спільноти та підвищити достовірність результатів. Це важливий крок для розвитку колективної експертизи в галузі.

Загальною метою подальших досліджень є подальший розвиток data-driven підходу як

ефективного інструменту для аналізу тепло-фізичних властивостей композитів та впровадження його в різноманітні галузі індустрії та науки.

#### Список літератури

- Wu, L., Zhang, P., Xu, B., Liu, J., Yin, H., Zhang, L., Jiang, X., Zhang, C., Zhang, R., Wang, Y., & Qu, X. (2023). *Data-driven design of brake pad composites for high-speed trains*. *Journal of Materials Research and Technology*, 27, 1058-1071. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.09.280>
- He, Z.C., Huo, S.L., Li, Eric., Cheng, H.T., & Zhang, L.M. (2022). *Data-driven approach to characterize and optimize properties of carbon fiber non-woven composite materials*. *Composite Structures*, 297, 115961. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.115961>
- Fathidoost, M., Yang, Y., Oechsner, M., & Xu, B.-X. (2023). *Data-driven thermal and percolation analyses of 3D composite structures with interface resistance*. *Materials & Design*, 227, 111746. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.111746>
- Ciampaglia, A. (2023). *Data-driven statistical method for the multiscale characterization and modelling of fiber reinforced composites*. *Composite Structures*, 320, 117215. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2023.117215>
- Malley, S., Reina, C., Nacy, S., Gilles, J., Koohbor, B., & Youssef, G. (2022). *Predictability of mechanical behavior of additively manufactured particulate composites using machine learning and data-driven approaches*. *Computers in Industry*, 142, 103739. <https://doi.org/10.1016/j.compind.2022.103739>
- Barkanov E. et al. *Experimental validation of thermo-chemical algorithm for a simulation of pultrusion processes*. *Journal of Physics Conference Series*. April 2018. DOI: 10.1088/1742-6596/991/1/012009.
- Barkanov, E., Akishin, P., Miazza, N. L., Galvez, S. (2017). *ANSYS-based algorithms for a simulation of pultrusion processes*. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 24(5), 377-384. <https://doi.org/10.1080/15376494.2016.1191096>
- Roux J. A., Vaughan J. G., Shanku R., et al. (1998). *Comparison of measurements and modeling for pultrusion of a fiberglass/epoxy I-beam*. *Journal of Reinforced Plastics and Composites* 17(17), 1557-1579.
- Liu X. L. and Hillier W. (1999). *Heat transfer and cure analysis for the pultrusion of a fiberglass-vinyl ester I-beam*. *Composites Structures* 47, 581-588.
- Liang G, Garg A, and Chandrashekhara K (2005). *Cure characterization of pultruded soy-based composites*. *Journal of Reinforced Plastics and Composites* 24(14), 1509–1520.
- Lvov, G. I. (2022). *Numerical Homogenization of the Thermophysical Properties of Fibrous Composites*. *Mechanics of Composite Materials*, 58(5), 613-628. <https://doi.org/10.1007/s11029-022-10054-x>
- E. Barkanov, P. Akishin, E. Namson, J. Auzins, A. Morozovs *Optimization of Pultrusion Processes for an Industrial Application* *Mechanics of Composite Materials*, 2021, № 6, p. 697-712
- Zhu, J., Chandrashekhara, K., Flanigan, V., Kapila, S. (2004). *Manufacturing and mechanical properties of soy-based composites using pultrusion*. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 35(1), 95-101. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2003.08.007>
- Eleftheroglou, N., Zarouchas, D., & Benedictus, R. (2020). *An adaptive probabilistic data-driven methodology for prognosis of the fatigue life of composite structures*. *Composite Structures*, 245, 112386. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112386>
- Huang, T., Gao, J., Sun, Q., Zeng, D., Su, X., Liu, W. K., & Chen, W. (2021). *Stochastic nonlinear analysis of unidirectional fiber composites using image-based microstructural uncertainty quantification*. *Composite Structures*, 260, 113470. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.113470>
- Saenz-Dominguez, I., Tena, I., Esnaola, A., Sarrionandia, M., Torre, J., & Aurrekoetxea, J. (2019). *Design and characterisation of cellular composite structures for automotive crash-boxes manufactured by out of die ultraviolet cured pultrusion*. *Composites Part B: Engineering*, 160, 217-224. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.10.046>
- G.I. Lvov. *Numerical Homogenization of the Thermophysical Properties of Fibrous Composites*. *Mechanics of Composite Materials*. — 2022. — Vol. 58, No. 5. — P. 613-628
- Tian W., Chao X., Fu M.W., Qi L., Ju L. *New numerical algorithm for the periodic boundary condition for predicting the coefficients of thermal expansion of composites*. *Mechanics of Materials*. — 2021. — Vol. 154. — Article 103737.
- Lee D, Song Y. S. *Modeling the effects of elastic modulus and thermal expansion coefficient on the shrinkage of glass fiber reinforced composites*. *Composites: Part B*. — 2018. — Vol. 146. — P. 98—105.
- Sun Z., Shan Z., Shao T., Li J., Wu X. *A multiscale modeling for predicting the thermal expansion behaviors of 3D C/SiC composites considering porosity and fiber volume fraction*. *Ceramics International*. — 2021. — Vol. 47, Iss. 6. — P. 7925—7936.
21. Sobhaniragh, B., Batra, R. C., Mansur, W. J., Peters, F. C. (2017). *Thermal response of ceramic matrix nanocomposite cylindrical shells using Eshelby-Mori-Tanaka homogenization scheme*. *Composites Part B: Engineering*, 118, 41-53. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2017.02.032>
22. Koohbor, B., Ravindran, S., & Kidane, A. (2018). *A multiscale experimental approach for correlating global and local deformation response in woven composites*. *Composite Structures*, 194, 328-334. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.04.016>
23. Zhou L., Yuan T. B., Yang X. S., Liu Z. Y., Wang Q. Z., Xiao B. L., Ma Z. Y. *Microscale prediction of effective thermal conductivity of CNT/Al composites by finite element method*. *International Journal of Thermal Sciences*. — 2022. — Vol. 171, Jan. — Article 107206.
24. Wu, L., Adam, L., & Noels, L. (2021). *Micro-mechanics and data-driven based reduced order models for multi-scale analyses of woven composites*. *Composite Structures*, 270, 114058. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.114058>
25. Veenstra, S.W.P., Wijskamp, S., Rosić, B., & Akkerman, R. (2022). *Bending behaviour of thermoplastic composites in melt: A data-driven approach*. *Composites Science and Technology*, 219, 109220. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2021.109220>
26. Cheung, H.L., & Mirkhalaf, M. (2024). *A multi-fidelity data-driven model for highly accurate and computationally efficient modeling of short fiber composites*. *Composites Science and Technology*, 246, 110359. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2023.110359>
27. Castricum, B.A., Fagerström, M., Ekh, M., Larsson, F., & Mirkhalaf, S.M. (2022). *A computationally efficient coupled multi-scale model for short fiber reinforced composites*. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 163, 107233. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107233>
28. Mirkhalaf, S.M., Eggels, E.H., van Beurden, T.J.H., Larsson, F., & Fagerström, M. (2020). *A finite element based orientation averaging method for predicting elastic properties of short fiber reinforced composites*. *Composites Part B: Engineering*, 202, 108388. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.108388>
29. Mirkhalaf, S.M., van Beurden, T.J.H., Ekh, M., Larsson, F., & Fagerström, M. (2022). *An FE-based orientation averaging model for elasto-plastic behavior of short fiber composites*. *International Journal of Mechanical Sciences*, 219, 107097. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2022.107097>

#### References (transliterated)

- Wu, L., Zhang, P., Xu, B., Liu, J., Yin, H., Zhang, L., Jiang, X., Zhang, C., Zhang, R., Wang, Y., & Qu, X. (2023). *Data-driven design of brake pad composites for high-speed trains*. *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 27, pp. 1058-1071. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.09.280>
- He, Z. C., Huo, S. L., Li, Eric, Cheng, H. T., & Zhang, L. M. (2022). *Data-driven approach to characterize and optimize properties of carbon fiber non-woven composite materials*. *Composite Structures*, vol. 297, 115961. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.115961>
- Fathidoost, M., Yang, Y., Oechsner, M., & Xu, B.-X. (2023). *Data-driven thermal and percolation analyses of 3D composite structures with interface resistance*. *Materials & Design*, vol. 227, 111746. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.111746>
- Ciampaglia, A. (2023). *Data-driven statistical method for the multiscale characterization and modelling of fiber reinforced composites*. *Composite Structures*, vol. 320, 117215. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2023.117215>
- Malley, S., Reina, C., Nacy, S., Gilles, J., Koohbor, B., & Youssef, G. (2022). *Predictability of mechanical behavior of additively manufactured particulate composites using machine learning and*

- data-driven approaches. *Computers in Industry*, vol. 142, 103739. <https://doi.org/10.1016/j.compind.2022.103739>
6. Barkanov, E., et al. (2018). Experimental validation of thermochemical algorithm for a simulation of pultrusion processes. *Journal of Physics Conference Series*, vol. 991, no. 1, April 2018. DOI: 10.1088/1742-6596/991/1/012009.
  7. Barkanov, E., Akishin, P., Miazza, N. L., & Galvez, S. (2017). ANSYS-based algorithms for a simulation of pultrusion processes. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, vol. 24, no. 5, pp. 377-384. <https://doi.org/10.1080/15376494.2016.1191096>
  8. Roux, J. A., Vaughan, J. G., Shanku, R., et al. (1998). Comparison of measurements and modeling for pultrusion of a fiberglass/epoxy I-beam. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, vol. 17, no. 17, pp. 1557-1579.
  9. Liu, X. L., & Hillier, W. (1999). Heat transfer and cure analysis for the pultrusion of a fiberglass-vinyl ester I-beam. *Composite Structures*, vol. 47, pp. 581-588.
  10. Liang, G., Garg, A., & Chandrashekhara, K. (2005). Cure characterization of pultruded soy-based composites. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, vol. 24, no. 14, pp. 1509-1520.
  11. Lvov, G. I. (2022). Numerical Homogenization of the Thermophysical Properties of Fibrous Composites. *Mechanics of Composite Materials*, vol. 58, no. 5, pp. 613-628. <https://doi.org/10.1007/s11029-022-10054-x>
  12. Barkanov, E., Akishin, P., Namsone, E., Auzins, J., & Morozovs, A. (2021). Optimization of Pultrusion Processes for an Industrial Application. *Mechanics of Composite Materials*, no. 6, pp. 697-712.
  13. Zhu, J., Chandrashekhara, K., Flanigan, V., & Kapila, S. (2004). Manufacturing and Mechanical Properties of Soy-based Composites using Pultrusion. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 35, no. 1, pp. 95-101. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2003.08.007>
  14. Eleftheroglou, N., Zarouchas, D., & Benedictus, R. (2020). An adaptive probabilistic data-driven methodology for prognosis of the fatigue life of composite structures. *Composite Structures*, vol. 245, 112386. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112386>
  15. Huang, T., Gao, J., Sun, Q., Zeng, D., Su, X., Liu, W. K., & Chen, W. (2021). Stochastic nonlinear analysis of unidirectional fiber composites using image-based microstructural uncertainty quantification. *Composite Structures*, vol. 260, 113470. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.113470>
  16. Saenz-Dominguez, I., Tena, I., Esnaola, A., Sarrionandia, M., Torre, J., & Aurrekoetxea, J. (2019). Design and characterisation of cellular composite structures for automotive crash-boxes manufactured by out of die ultraviolet cured pultrusion. *Composites Part B: Engineering*, vol. 160, pp. 217-224. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.10.046>
  17. Lvov, G. I. (2022). Numerical Homogenization of the Thermophysical Properties of Fibrous Composites. *Mechanics of Composite Materials*, vol. 58, no. 5, pp. 613-628. <https://doi.org/10.1007/s11029-022-10054-x>
  18. Tian, W., Chao, X., Fu, M. W., Qi, L., & Ju, L. (2021). New numerical algorithm for the periodic boundary condition for predicting the coefficients of thermal expansion of composites. *Mechanics of Materials*, vol. 154, Article 103737.
  19. Lee, D., & Song, Y. S. (2018). Modeling the effects of elastic modulus and thermal expansion coefficient on the shrinkage of glass fiber reinforced composites. *Composites: Part B*, vol. 146, pp. 98-105.
  20. Sun, Z., Shan, Z., Shao, T., Li, J., & Wu, X. (2021). A multiscale modeling for predicting the thermal expansion behaviors of 3D C/SiC composites considering porosity and fiber volume fraction. *Ceramics International*, vol. 47, no. 6, pp. 7925-7936.
  21. Sobhaniaragh, B., Batra, R. C., Mansur, W. J., & Peters, F. C. (2017). Thermal response of ceramic matrix nanocomposite cylindrical shells using Eshelby-Mori-Tanaka homogenization scheme. *Composites Part B: Engineering*, vol. 118, pp. 41-53. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2017.02.032>
  22. Koohbor, B., Ravindran, S., & Kidane, A. (2018). A multiscale experimental approach for correlating global and local deformation response in woven composites. *Composite Structures*, vol. 194, pp. 328-334. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.04.016>
  23. Zhou, L., Yuan, T. B., Yang, X. S., Liu, Z. Y., Wang, Q. Z., Xiao, B. L., & Ma, Z. Y. (2022). Microscale prediction of effective thermal conductivity of CNT/Al composites by finite element method. *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 171, Article 107206.
  24. Wu, L., Adam, L., & Noels, L. (2021). Micro-mechanics and data-driven based reduced order models for multi-scale analyses of woven composites. *Composite Structures*, vol. 270, 114058. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.11405825>
  25. Veenstra, S. W. P., Wijskamp, S., Rosić, B., & Akkerman, R. (2022). Bending behaviour of thermoplastic composites in melt: A data-driven approach. *Composites Science and Technology*, vol. 219, 109220. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2021.109220>
  26. Cheung, H. L., & Mirkhalaf, M. (2024). A multi-fidelity data-driven model for highly accurate and computationally efficient modeling of short fiber composites. *Composites Science and Technology*, vol. 246, 110359. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2023.110359>
  27. Castricum, B. A., Fagerström, M., Ekh, M., Larsson, F., & Mirkhalaf, S. M. (2022). A computationally efficient coupled multi-scale model for short fiber reinforced composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 163, 107233. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107233>
  28. Mirkhalaf, S. M., Eggels, E. H., van Beurden, T. J. H., Larsson, F., & Fagerström, M. (2020). A finite element based orientation averaging method for predicting elastic properties of short fiber reinforced composites. *Composites Part B: Engineering*, vol. 202, 108388. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.108388>
  29. Mirkhalaf, S. M., van Beurden, T. J. H., Ekh, M., Larsson, F., & Fagerström, M. (2022). An FE-based orientation averaging model for elasto-plastic behavior of short fiber composites. *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 219, 107097. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2022.107097>

Надійшла (received) 01.03.2024

#### Відомості про авторів/ About the Authors

**Лавценко Руслан Ровшан огли (Lavshchenko Ruslan)** – аспірант кафедри математичного моделювання та інтелектуальних обчислень в інженерії, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»; [ruslan.lavshchenko@infiz.khpi.edu.ua](mailto:ruslan.lavshchenko@infiz.khpi.edu.ua); ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-3649-1118>

**Львов Геннадій Іванович (Lvov Gennadiy)** – доктор технічних наук, професор, професор кафедри математичного моделювання та інтелектуальних обчислень в інженерії, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»; e-mail: [lvovdpm@ukr.net](mailto:lvovdpm@ukr.net); ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0297-9227>