

doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1197-1207

УДК 620.178.152.341.4, 004.94, 303.724.32, 004.032.26

Определение оптимального метода машинного обучения для построения прогнозных моделей микротвердости по Виккерсу керамического композитного материала гидроксиапатит-многостенные углеродные нанотрубки

Анастасия Евгеньевна Резванова^{1✉}, Борис Сергеевич Кудряшов²,
Владимир Юрьевич Погудин³

^{1,2,3} Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук,
Томск, 634055, Российская Федерация

³ Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, 634050, Российская
Федерация

¹ ranast@ispms.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-7067-7979>

² bsk3@ispms.ru, <https://orcid.org/0009-0000-5133-4893>

³ pogudin.vova@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0002-7191-163X>

Аннотация

Введение. Долговечность и износостойкость керамических имплантатов, используемых в условиях высоких эксплуатационных нагрузок, в значительной степени зависят от их механических характеристик. Керамический композит на основе гидроксиапатита рассматривается как перспективный биоматериал для реконструкции поврежденных костных тканей и замещения костных дефектов благодаря своей биосовместимости и способности обеспечивать остеоинтеграцию с костной тканью. Для повышения механической прочности предлагается армировать керамику на основе гидроксиапатита многостенными углеродными нанотрубками, обладающими высокими физико-механическими характеристиками. Данный подход направлен на применение материалов в зонах имплантации, испытывающих значительные механические нагрузки. Эффективность армирования нанотрубками во многом зависит от состава композита, технологии синтеза и условий испытаний, что приводит к высокой вариативности итоговых характеристик. Прямое экспериментальное определение свойств каждого образца требует значительных временных затрат. Для оптимизации процесса исследования механических характеристик композитных материалов представляется актуальным использование математических моделей, основанных на методах машинного обучения, что позволяет прогнозировать микротвердость по Виккерсу в зависимости от нагрузки индентирования. **Метод.** Экспериментальные испытания на микротвердость по Виккерсу для шести серий керамических образцов проводились методом индентирования при нагрузках в диапазоне от 0,98 Н до 9,8 Н. Для прогнозирования полученных данных были применены три метода машинного обучения: нейронная сеть, метод случайного леса и градиентный бустинг. **Основные результаты.** В результате исследования после усреднения значений по всем нагрузкам индентирования для каждого образца определено, что с увеличением концентрации многостенных углеродных нанотрубок до 0,5 масс.% микротвердость композита по сравнению с гидроксиапатитом без добавок возрастает от $3,83 \pm 0,39$ ГПа до $4,71 \pm 0,40$ ГПа, а армирование становится эффективным на 19 %. Таким образом, наибольший вклад в повышение микротвердости композита внесли добавки с концентрацией 0,5 масс.%, при этом добавление 1 и 2 масс.% привело к значительному снижению микротвердости, что связано с возникновением агломерации нанотрубок в керамической матрице. **Обсуждение.** Результаты моделирования позволили на основе данных экспериментального исследования определить оптимальный метод машинного обучения для построения прогнозной модели микротвердости композитной керамики гидроксиапатит-многостенные углеродные нанотрубки в широком диапазоне нагрузок, а также установить взаимосвязь между составом композита и его механическими характеристиками, что открывает новые возможности для проектирования прочных и долговечных керамических имплантатов.

Ключевые слова

гидроксиапатит, многостенные углеродные нанотрубки, микротвердость по Виккерсу, прогнозирование, методы регрессии, машинное обучение

Благодарности

© Резванова А.Е., Кудряшов Б.С., Погудин В.Ю., 2025

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-20233 (<https://rscf.ru/project/25-23-20233/>) и гранта в форме субсидии, выделяемого Департаментом по научно-технологическому развитию и инновационной деятельности Томской области (Соглашение № 02/5/2025).
Исследования выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Нанотех» Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН.

Ссылка для цитирования: Резванова А.Е., Кудряшов Б.С., Погудин В.Ю. Определение оптимального метода машинного обучения для построения прогнозных моделей микротвердости по Виккерсу керамического композитного материала гидроксиапатит-многостенные углеродные нанотрубки // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2025. Т. 25, № 6. С. 1197–1207. doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1197-1207

Machine-learning method for the development of a Vickers microhardness predictive model of a hydroxyapatite-multi-walled carbon nanotube ceramic composite material

Anastasiya E. Rezvanova¹✉, Boris S. Kudryashov², Vladimir Yu. Pogudin³

^{1,2,3} Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, 634055, Russian Federation

³ Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, 634050, Russian Federation

¹ ranast@ispms.ru ✉, <https://orcid.org/0000-0002-7067-7979>

² bsk3@ispms.ru, <https://orcid.org/0009-0000-5133-4893>

³ pogudin.vova@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0002-7191-163X>

Abstract

The durability and wear resistance of ceramic implants, used under high operating loads largely, depend on their mechanical characteristics. Ceramic composite based on hydroxyapatite is considered as a promising biomaterial for reconstruction of damaged bone tissues and replacement bone defects due to its biocompatibility and ability to provide osseointegration with bone tissue. In this work, to increase mechanical strength, the hydroxyapatite ceramics was reinforced by multi-walled carbon nanotubes additives which have high physical and mechanical properties. The potential of such research lies in the use of these composites in implantation areas that experience significant mechanical loads. The effectiveness of nanotubes reinforcement depends on the ceramics composition, synthesis technology, and testing conditions, resulting in high variability in the final characteristics. At the same time, direct experimental study of the properties of each sample requires significant time-cost. The use of mathematical models based on machine learning methods to optimize the process of analysis the mechanical characteristics of composite materials is relevant study. This will allow us to predict Vickers microhardness depending on the indentation load. In this study, experimental microhardness tests were carried out by using Vickers method for six sets of ceramic materials which were exposed to indentation loads ranging from 0.98 N to 9.8 N. Three machine learning methods were used to predict the data obtained: neural network, random forest and gradient boosting. After averaging the values for all loads, it was determined that with the increasing the concentration of multi-walled carbon nanotubes to 0.5 wt. % the Vickers microhardness of the composite increases from 3.83 ± 0.39 GPa to 4.71 ± 0.40 GPa compared to hydroxyapatite without additives, and reinforcement becomes effective by 19 %. Thus, the greatest contribution to the increase in the microhardness of the composite was made by the additives of multi-walled carbon nanotubes with a concentration of 0.5 wt.%, while the addition of 1 and 2 wt.% led to a significant decrease in microhardness, which is associated with the appearance of multi-walled carbon nanotubes agglomeration in the ceramic hydroxyapatite matrix. The simulation results based on experimental data allowed us to determine the optimal machine learning method for constructing a predictive model of the microhardness of hydroxyapatite - multi-walled carbon nanotubes ceramic composite in a wide range of loads. In addition, it was possible to establish the relationship between the composition of the composite and its mechanical characteristics, which opens up new possibilities for designing strong and durable ceramic implants.

Keywords

hydroxyapatite, multi-walled carbon nanotubes, Vickers microhardness, prediction, regression methods, machine learning

Acknowledgements

This research was carried out with support from the Russian Science Foundation grant No. 25-23-20233 (<https://rscf.ru/project/25-23-20233/>) and a subsidy grant allocated by the Department of Scientific, Technological Development and Innovative Activities of the Tomsk Region (Agreement No. 02/5/2025).

The authors like to express their gratitude towards the management of Core Facility Centre “Nanotech” of the Institute of Strength Physics and Materials Science of the SB RAS for equipment employed in these studies.

For citation: Rezvanova A.E., Kudryashov B.S., Pogudin V.Yu. Machine-learning method for the development of a Vickers microhardness predictive model of a hydroxyapatite-multi-walled carbon nanotube ceramic composite material. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2025, vol. 25, no. 6, pp. 1197–1207 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1197-1207

Введение

В настоящее время ведется активная разработка композитных материалов, применимых в качестве ме-

дицинских имплантатов. Их устойчивость к внешним нагрузкам определяется множеством факторов, включая состав, структуру и физико-механические свойства материалов, из которых они изготовлены. Создание

современных композитов для восстановления или замены поврежденной костной ткани требует сочетания биосовместимости и достаточной механической прочности, что традиционно оценивается преимущественно экспериментально с использованием сложного оборудования и значительных ресурсов. Для улучшения эксплуатационных характеристик композитов в их состав вводят различные функциональные добавки. Свойства этих добавок — от химического состава и степени дисперсности до формы, твердости и концентрации — определяют итоговые характеристики материала.

Среди биodeградируемых керамических материалов особый интерес представляет гидроксиапатит (ГА) — фосфат кальция, структура которого близка к строению естественной костной ткани. Благодаря высокой биосовместимости и биоактивности ГА широко применяется в регенерации костной ткани и остеointegrации имплантатов [1–4]. Однако низкие, по сравнению с костными тканями, механические свойства ГА ограничивают его применение в зонах, подвергающихся значительным механическим нагрузкам [5–7]. Для повышения прочностных характеристик ГА все чаще комбинируют с различными нанодобавками, среди которых особое внимание привлекают многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ). Добавление МУНТ способствует улучшению механической прочности, износостойкости и трещиностойкости композитной керамики, сохраняя ее высокую биоактивность и биосовместимость [8–14].

Одним из ключевых свойств композитов является твердость, которая отражает способность материалов противостоять упругим и пластическим деформациям под внешним воздействием. Для измерения микротвердости малых или тонких образцов широко применяется метод индентирования пирамидой Виккерса (микротвердость по Виккерсу), который, помимо измерения микротвердости, позволяет оценивать равномерность фазового распределения, локальные химические неоднородности и протяженность диффузионных слоев [15–18]. Создание композитных материалов на основе ГА с добавками МУНТ требует всестороннего изучения их физико-механических и химических характеристик. Экспериментальные измерения формируют обширные массивы числовых данных, которые обычно систематизируются в виде таблиц и графиков для дальнейшего анализа. При обработке таких данных традиционные методы аппроксимации часто сталкиваются с рядом ограничений: необходимость заранее выбирать тип подходящей функции, риск недостаточной гибкости при описании сложных нелинейных зависимостей, чувствительность к шуму и пробелам в исходной информации. Эти факторы затрудняют получение надежных зависимостей при большом объеме экспериментальных данных. В результате целесообразно использовать машинное обучение (МО), которое позволяет интерполировать недостающие данные и прогнозировать свойства материалов с учетом сложных взаимосвязей.

Методы машинного обучения в прогнозировании свойств материалов

Методы МО, в частности, искусственные нейронные сети, зарекомендовали себя как универсальные аппроксиматоры, способные точно выявлять нелинейные зависимости и прогнозировать физические и механические свойства материалов на основе ограниченных выборок [19–21]. Применение этих методов позволяет прогнозировать такие параметры, как микротвердость, прочность на разрыв и другие ключевые характеристики композитов [22–24], демонстрируя высокую точность даже при работе с небольшими наборами экспериментальных данных [25, 26].

Эффективность в прогнозировании также была доказана методом градиентного бустинга, с помощью которого предсказан коэффициент интенсивности напряжений пултрузионного композитного материала с погрешностью менее 10 %, эквивалентной экспериментальной ошибке [27]. В работе [28] рассмотрено прогнозирование изгибных свойств клееных деревянных элементов, усиленных полимерами, армированными углеродным волокном. Наилучший прогноз по оценке метрики R^2 был сделан с помощью метода случайного леса, что вносит вклад в предсказание свойств балок разных размеров. В [29] использован метод случайного леса с наилучшей точностью прогнозирования для оценки и ранжирования влияния входных переменных (состав смеси, параметры обработки и условия испытаний) на модуль Юнга, прочность на изгиб и вязкость разрушения сверхвысокотемпературных термопластов, что является подходящим методом для получения надежных прогнозов свойств до разработки теоретических моделей. Другие результаты применения МО показывают, что рекуррентные модели нейронных сетей могут точно предсказывать модуль упругости композитных материалов, армированных углеродными волокнами, достигая значений R^2 до 0,98 [30]. В работе [31] рассмотрено применение набора методов, основанных на анализе данных, для прогнозирования наиболее часто используемых механических свойств стальных труб на сталелитейных заводах, а именно предела текучести, предела прочности при растяжении и твердости. Модель искусственной нейронной сети удовлетворительно справилась с прогнозированием прочности на разрыв со средней ошибкой 3,7 %. В [32] применялся метод ансамблевого обучения для прямого прогнозирования твердости по Виккерсу в зависимости от нагрузки. Полученные модели показали, что твердость керамики или металлов можно точно спрогнозировать при любой заданной нагрузке с помощью тщательно настроенной модели МО. В работе [33] была создана успешная модель МО, в которой применен регрессор градиентного бустинга для прогнозирования твердости и использованы механические свойства твердого тела (модуль объемной упругости, модуль сдвига, модуль Юнга и коэффициент Пуассона) в качестве входных переменных. Модель была обучена на экспериментальной базе данных по твердости по Виккерсу для 143 материалов, что позволило охватить различные типы соединений. В [34] представлена система, основанная

на реальных данных, с применением экстремального градиентного бустинга для прогнозирования твердости керамики из нитрида кремния (Si_3N_4), армированной графеновыми волокнами. Определены параметры, которые особенно влияют на твердость Si_3N_4 . Наиболее значимыми из них являются: давление при спекании, время спекания и плотность. Параметры спекания, в частности давление при спекании, температура, время выдержки и технология, максимально влияют на плотность, конечный размер зерен, состав Si_3N_4 и, как следствие, на твердость. Таким образом, работы [19–34] показали, что методы МО при обработке данных керамических и композитных материалов имеют высокую эффективность при прогнозировании механических свойств, которые представляются набором экспериментальных данных со сложными нелинейными зависимостями.

Цель работы — построение компьютерных моделей с помощью методов МО, таких как метод градиентного бустинга, метод случайного леса решений, а также используя нейросетевое моделирование на основе полносвязной нейронной сети, для прогнозирования значений микротвердости композитов на основе ГА с добавками МУНТ в широком диапазоне нагрузок индентирования. Такие модели позволяют предсказывать твердость материала и нагрузку индентора без проведения дополнительных экспериментов, что существенно сокращает затраты ресурсов и ускоряет процесс разработки новых биоматериалов.

Объект исследований

Объектом исследований в настоящей работе стали керамические композитные материалы на основе ГА без добавок (серия 1), а также с различным содержанием МУНТ: 0,1; 0,2; 0,5; 1 и 2 масс.% (серии 2–6). Испытания на микротвердость по Виккерсу проводились методом индентирования на микротвердомере Affri-DM8 в диапазоне нагрузок (P) от 0,98 Н до 9,8 Н по 20 индентирований для каждого образца. На рис. 1 показаны зависимости микротвердости по Виккерсу от нагрузки индентирования керамических ГА материалов с различными концентрациями МУНТ. Усредненные значения микротвердости с указанием доверительных интервалов отражены в табл. 1.

По результатам рис. 1 и табл. 1 видно, что наибольшей микротвердостью по Виккерсу по сравнению с другими исследуемыми материалами обладает серия 4

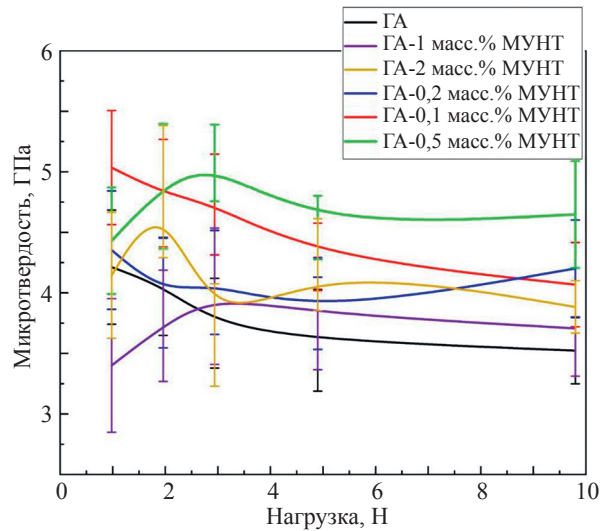


Рис. 1. Зависимость микротвердости по Виккерсу от нагрузки индентирования

Fig. 1. Dependence of Vickers microhardness on indentation load

образцов, имеющая в своем составе 0,5 масс.% МУНТ, что сопоставимо с результатами экспериментальных исследований в работах [35, 36]. При усреднении значений по всему диапазону нагрузок индентирования для каждой серии образцов установлено, что с увеличением нагрузки средняя твердость для данных материалов возрастает от $3,83 \pm 0,39$ ГПа до $4,71 \pm 0,40$ ГПа, увеличивая эффективность армирования на 18,68 %. Дальнейшее увеличение концентрации МУНТ до 1 и 2 масс.% приводит к значительному снижению микротвердости, что обуславливается возможной агломерацией МУНТ, возникающей в результате встраивания МУНТ в пористую структуру керамической матрицы ГА [37, 38].

Методы прогнозирования

Используем методы МО для аппроксимации полученных экспериментальных значений микротвердости по Виккерсу. Рассмотрим применение четырех методов.

Полиномиальная регрессия. Метод регрессионного анализа, который моделирует нелинейную зависимость между независимой переменной x и зависимой переменной y с помощью многочлена n -й степени. В основе полиномиальной регрессии лежит расширение

Таблица 1. Усредненные значения микротвердости керамических образцов, ГПа

Table 1. Average values of microhardness of ceramic samples, GPa

P , Н	Номер серии					
	1	2	3	4	5	6
0,98	$4,21 \pm 0,47$	$5,03 \pm 0,47$	$4,35 \pm 0,49$	$4,43 \pm 0,44$	$3,40 \pm 0,55$	$4,15 \pm 0,52$
1,96	$4,05 \pm 0,40$	$4,82 \pm 0,44$	$3,99 \pm 0,45$	$4,88 \pm 0,52$	$3,73 \pm 0,46$	$4,84 \pm 0,55$
2,94	$3,75 \pm 0,64$	$4,73 \pm 0,42$	$4,09 \pm 0,43$	$5,07 \pm 0,32$	$3,97 \pm 0,56$	$3,65 \pm 0,42$
4,90	$3,61 \pm 0,42$	$4,29 \pm 0,28$	$3,83 \pm 0,29$	$4,54 \pm 0,26$	$3,83 \pm 0,46$	$4,23 \pm 0,38$
9,80	$3,52 \pm 0,27$	$4,07 \pm 0,35$	$4,20 \pm 0,40$	$4,65 \pm 0,44$	$3,71 \pm 0,39$	$3,88 \pm 0,22$

линейной модели путем добавления степеней исходных признаков.

Случайный лес решений. Представляет собой ансамбль решающих деревьев, каждое из которых обучается на случайной подвыборке данных. Итоговое предсказание формируется как среднее значение по всем деревьям решений. Этот метод хорошо подходит для задач с зашумленными и нелинейными данными и устойчив к переобучению.

Метод градиентного бустинга. Построит последовательные деревья на ошибках предыдущих решений. Модель, получаемая с помощью данного метода, характеризуется высокой точностью и стабильностью за счет регуляризации и оптимизации структуры модели.

Методы случайного леса и градиентного бустинга часто используются в задачах, связанных с прогнозированием различных механических характеристик материалов, где показывают, особенно метод градиентного бустинга, высокую точность прогнозирования с коэффициентом детерминации $R^2 > 0,9$.

Нейросетевое моделирование. Реализуется в виде полносвязной архитектуры, где в качестве функции активации на слоях используется нелинейная функция, способствующая устойчивому обучению. Такие модели также показывают низкие показатели ошибок, в особенности на данных большой размерности и имеющих сложные закономерности. Для решения поставленной в настоящей работе задачи модели были построены с использованием библиотек Numpy, Pandas, Scikit-learn, XGBoost, а также Keras. У каждой модели присутствует большое количество различных параметров, также называемые гиперпараметрами, которые влияют на точность модели. Оптимальные параметры моделей были подобраны с помощью метода сеточного поиска GridSearchCV библиотеки Scikit-learn. Однако подбор архитектуры нейронной сети (количество нейронов на

слоях, функции активации) осуществлялся методом байесовской оптимизации библиотеки Keras. В табл. 2 представлены результаты оптимизации гиперпараметров.

Качество всех моделей оценивалось с использованием метрик: R^2 — коэффициент детерминации; Mean Squared Error (MSE) — среднеквадратичная ошибка; Mean Squared Error (MAE) — средняя абсолютная ошибка; Mean Absolute Percentage Error (MAPE) — средняя абсолютная процентная ошибка. На вход моделям на основе методов (табл. 2) подавались значения концентрации МУНТ и нагрузки индентирования, а в качестве выходных параметров рассматривались предсказанные значения твердости и соответствующий доверительный интервал (для вероятности 0,95), рассчитанный по экспериментальным данным.

Моделирование микротвердости по Виккерсу керамики на основе гидроксипатита

Рассмотрим результаты применения исследуемых методов МО для прогнозирования микротвердости композитов в зависимости от нагрузки и содержания МУНТ. Итоговые значения метрик приведены в табл. 3.

Из полученных результатов видно, что метод полиномиальной регрессии продемонстрировал наихудшие показатели точности в сравнении с другими методами: самое низкое значение $R^2 = 0,5308$ и высокие значения отклонений $MSE = 0,0534$. Для наглядной оценки был построен график отклонений предсказанных значений от экспериментальных (рис. 2, а), а также график зависимости твердости от нагрузки для одной из серии образцов (рис. 2, б), который включает экспериментальные точки, средние значения и предсказанные значения с доверительными интервалами на примере образца серии 2.

Таблица 2. Оптимальные параметры моделей

Table 2. Optimal parameters of the models

Метод обучения модели	Гиперпараметры модели	Величина
Метод случайного леса	Глубина дерева	10
	Минимальное число объектов в листе	3
	Минимальное число объектов для разбиения	2
	Число деревьев	150
Метод градиентного бустинга	Глубина дерева	4
	Коэффициент скорости обучения	0,1
	Минимальный вес узлов	5
	Доля признаков	1,0
	Доля выборки	1,0
	Число деревьев	1500
Метод нейросетевого моделирования	Функция активации	SeLU
	Оптимизатор	RMSprop
	Количество нейронов во входном слое	70
	Количество нейронов в скрытом слое	55

Таблица 3. Метрики оценки качества регрессионных моделей

Table 3. Performance metrics of prediction models

Метод обучения модели	R ²	MSE	MAE	MAPE, %
Полиномиальная регрессия	0,5308	0,0534	0,1538	0,09
Метод случайного леса	0,5403	0,0416	0,1510	0,10
Метод градиентного бустинга	0,8730	0,0069	0,0646	0,05
Метод нейросетевого моделирования	0,9546	0,0043	0,0353	0,02

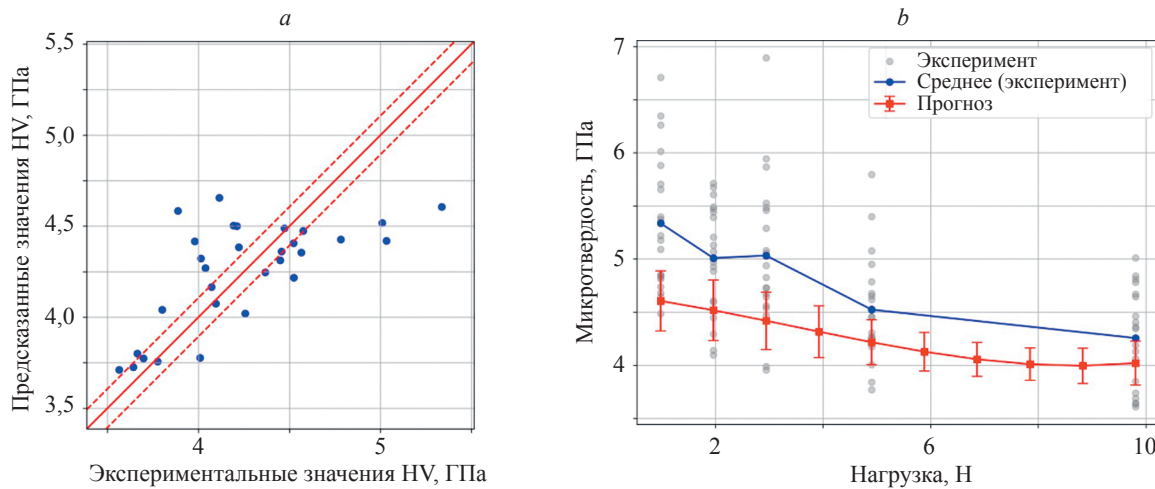


Рис. 2. Результаты моделирования методом полиномиальной регрессии: отклонение предсказанных от экспериментальных значений микротвердости по Виккерсу (HV) (a); зависимость экспериментальных и предсказанных значений микротвердости от нагрузки для образца серии 2 (b)

Fig. 2. Predicted Vickers microhardness using a polynomial regression model vs. experimental values (a) and indentation load (b)

Из рис. 2, а видно, что экспериментальные данные характеризуются значительным разбросом, особенно при средних и высоких нагрузках индентирования. В отдельных случаях доверительные интервалы, рассчитанные на основе предсказанных значений, не перекрывают средние экспериментальные значения,

что указывает на ограниченную точность модели в некоторых областях. Тем не менее, общая тенденция изменения твердости с ростом нагрузки и концентрации МУНТ частично улавливается моделью. Метод полиномиальной регрессии позволил аппроксимировать зависимость твердости от концентрации МУНТ

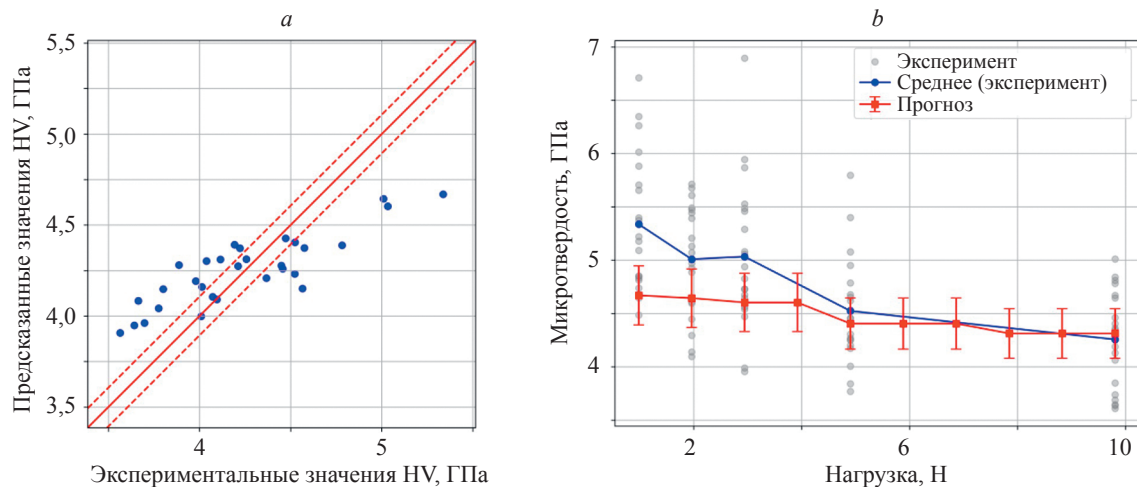


Рис. 3. Результаты моделирования методом случайного леса: отклонение предсказанных от экспериментальных значений микротвердости по Виккерсу (HV) (a); зависимость экспериментальных и предсказанных значений микротвердости от нагрузки (b) для образца серии 2

Fig. 3. Predicted Vickers microhardness using a random forest model vs. experimental values (a) and indentation load (b)

и нагрузки с учетом их нелинейной взаимосвязи (рис. 2, *b*). Метод случайного леса (рис. 3) демонстрирует небольшой прирост в сравнении с результатами полинома.

Оценка качества построенной модели методом случайного леса (табл. 3) показала следующие метрики: $R^2 = 0,5403$, $MSE = 0,0416$. Величины $MAE = 0,1510$ и $MAPE = 0,10\%$, в свою очередь, стали несколько выше, чем у модели полиномиальной регрессии. Анализ графика отклонений предсказанных значений от экспериментальных (рис. 3, *a*) показывает, что многие значения выходят за пределы отклонения $\pm 5\%$, что свидетельствует о достаточно высоком уровне ошибок.

Отметим, что на графике зависимости твердости от нагрузки наблюдается эффект «ступенчатости» (рис. 3, *b*): модель часто предсказывает одинаковые значения твердости для разных промежуточных значений нагрузки. Это характерно для метода случайного леса, с помощью которого формируются кусочно-постоянные приближения. Однако это приводит к недостоверной интерполяции, поскольку модель не учитывает, что твердость могла бы плавно возрастать или убывать, что характерно для таких свойств материалов.

Модель, построенная с помощью метода градиентного бустинга, показала значительно более высокое качество прогнозирования по сравнению с применением методов полиномиальной регрессии и случайного леса (рис. 4). На графике отклонения предсказанных значений от экспериментальных видно, что некоторые значения выходят за пределы допустимого отклонения в $\pm 5\%$, что свидетельствует о высокой точности полученной модели (рис. 4, *a*). Кроме того, значения метрик, таких как $R^2 = 0,8730$ и $MAPE = 0,05\%$, подтверждают способность метода хорошо подстраиваться под данные.

Несмотря на полученные высокие значения метрик, при анализе графика зависимости твердости от нагрузки можно заметить эффект «ступенчатости», аналогичный тому, что наблюдается в модели случайного леса (рис. 4, *b*). Это означает, что модель предсказывает одинаковые значения твердости для широких диапазонов нагрузок, особенно между значениями, на которых она была обучена. Такой эффект ограничивает способность модели к качественной интерполяции и снижает ее физическую интерпретируемость, особенно в задачах, где важно предсказать плавные зависимости механических свойств от нагрузки. Модель нейронной сети продемонстрировала наилучшие результаты среди всех рассмотренных методов (рис. 5). На графике отклонения предсказанных значений от экспериментальных наблюдается минимальное количество точек, выходящих за пределы допустимого отклонения в $\pm 5\%$, меньшее, чем у модели градиентного бустинга (рис. 5, *a*). Это подтверждается высокими значениями метрик качества: $R^2 = 0,9546$, а $MAPE = 0,02\%$, что указывает на высокую точность и стабильность полученной модели.

На графике зависимости твердости от нагрузки (рис. 5, *b*) видно, что модель эффективно аппроксимирует экспериментальные данные: отсутствует эффект «ступенчатости», присущий деревообразным моделям, и предсказанные значения плавно следуют за усредненными экспериментальными точками. Благодаря способности нейронной сети выявлять сложные нелинейные зависимости, модель эффективно справляется с интерполяцией. Таким образом, нейросетевое моделирование может быть наиболее эффективным методом прогнозирования твердости композитов, обеспечивая высокую точность и хорошую аппроксимацию экспериментальных данных по всей области нагрузок индентирования и концентраций упрочняющих добавок МУНТ.

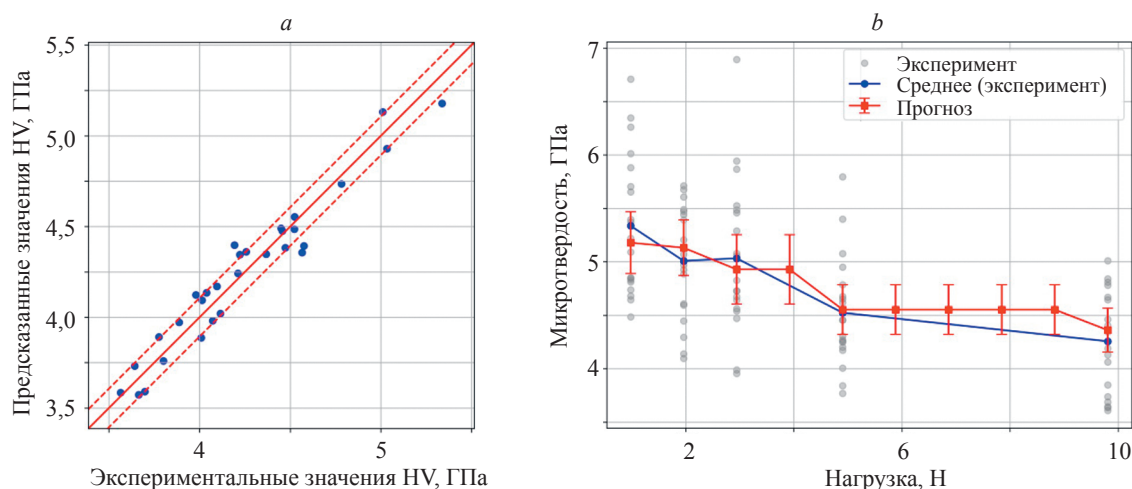


Рис. 4. Результаты моделирования методом градиентного бустинга: отклонение предсказанных от экспериментальных значений микротвердости по Виккерсу (HV) (*a*); зависимость экспериментальных и предсказанных значений микротвердости от нагрузки индентирования для образца серии 2 (*b*)

Fig. 4. Predicted Vickers microhardness using a gradient boosting model vs. experimental values (*a*) and indentation load (*b*)

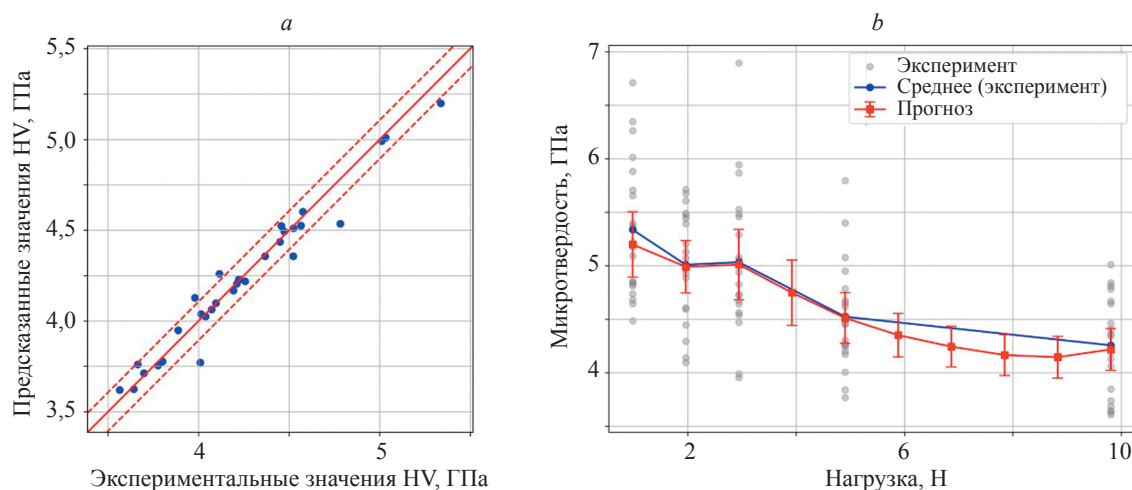


Рис. 5. Результаты нейросетевого моделирования: отклонение предсказанных от экспериментальных значений микротвердости по Виккерсу (HV) (a); зависимость экспериментальных и предсказанных значений микротвердости от нагрузки индентирования для образца серии 2 (b)

Fig. 5. Predicted Vickers microhardness using a neural network model vs. experimental values (a) and indentation load (b)

Заклучение

Изучена возможность прогнозирования микротвердости композитного материала на основе гидроксиапатита с добавками многостенных углеродных нанотрубок с использованием методов машинного обучения. Экспериментально показано, что введение многостенных углеродных нанотрубок оказывает выраженное влияние на твердость материала: наблюдалось увеличение микротвердости по Виккерсу с $3,83 \pm 0,39$ ГПа (для образца серии 1) до $4,71 \pm 0,40$ ГПа (для образца серии 4 с добавкой 0,5 масс.% нанотрубок), что указывает на эффект упрочнения на 19 %. Дальнейшее увеличение концентрации нанотрубок до 1 и 2 масс.% привело к значительному снижению микротвердости, что может быть связано с агломерацией нанотрубок, негативно влияющей на механические свойства материала.

Для построения предиктивных моделей были применены четыре метода: полиномиальная регрессия, случайный лес решений, метод градиентного бустинга и нейросетевое моделирование на основе полносвязной нейронной сети. Обучение проводилось на экспериментальных данных, полученных при измерении микротвердости в диапазоне различных нагрузок индентирования от 0,98 Н до 9,8 Н. В качестве признаков использовались значения нагрузки и концентрации многостенных углеродных нанотрубок. Для оценки качества моделей применялись метрики R^2 , MSE, MAE

и MAPE. Все модели были обучены с использованием перекрестной проверки и подбора гиперпараметров.

По результатам анализа установлено, что наилучшая точность обучения была получена с помощью нейронной сети: предсказанные значения практически совпадали с экспериментальными, модель не демонстрировала ступенчатого характера предсказаний, а количество значений, выходящих за границы допустимого отклонения, было минимальным. Модель на основе метода градиентного бустинга также представила высокие значения R^2 , подтверждающие ее способность хорошо адаптироваться к данным, описываемой в других исследованиях. Однако при использовании данной модели возник эффект «ступенчатости», аналогичный модели случайного леса, у которой, кроме того, наблюдалось большее число грубых отклонений. Полученная модель с применением полиномиальной регрессии продемонстрировала наихудшие результаты как по численным метрикам, так и по визуальному совпадению с экспериментальными значениями.

Таким образом, нейросетевое моделирование показало наивысшую эффективность в задаче прогнозирования микротвердости композитов на основе гидроксиапатита с добавками многостенных углеродных нанотрубок. Полученные модели могут быть использованы для интерполяции значений твердости при новых значениях нагрузки и концентрации нанотрубок и служить инструментом для планирования дальнейших экспериментальных исследований.

Литература

1. Fiume E., Magnaterra G., Rahdar A., Verné E., Bairo F. Hydroxyapatite for biomedical applications: A short overview // *Ceramics*. 2021. V. 4. N 4. P. 542–563. <https://doi.org/10.3390/ceramics4040039>
2. Rahman M., Li Y., Wen C. HA coating on Mg alloys for biomedical applications: A review // *Journal of Magnesium and Alloys*. 2020. V. 8. N 3. P. 929–943. <https://doi.org/10.1016/j.jma.2020.05.003>

References

1. Fiume E., Magnaterra G., Rahdar A., Verné E., Bairo F. Hydroxyapatite for biomedical applications: A short overview. *Ceramics*, 2021, vol. 4, no. 4, pp. 542–563. <https://doi.org/10.3390/ceramics4040039>
2. Rahman M., Li Y., Wen C. HA coating on Mg alloys for biomedical applications: A review. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2020, vol. 8, no. 3, pp. 929–943. <https://doi.org/10.1016/j.jma.2020.05.003>

3. Gu Y.W., Loh N.H., Khor K.A., Tor S.B., Cheang P. Spark plasma sintering of hydroxyapatite powders // *Biomaterials*. 2002. V. 23. N 1. P. 37–43. [https://doi.org/10.1016/S0142-9612\(01\)00076-X](https://doi.org/10.1016/S0142-9612(01)00076-X)
4. White A.A., Best S.M., Kinloch I.A. Hydroxyapatite–carbon nanotube composites for biomedical applications: a review // *International Journal of Applied Ceramic Technology*. 2007. V. 4. N 1. P. 1–13. <https://doi.org/10.1111/j.1744-7402.2007.02113.x>
5. Zhao X., Zheng J., Zhang W., Chen X., Gui Z. Preparation of silicon coated-carbon fiber reinforced HA bio-ceramics for application of load-bearing bone // *Ceramics International*. 2020. V. 46. N 6. P. 7903–7911. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.12.010>
6. Khalid P., Suman V.B. Carbon nanotube-hydroxyapatite composite for bone tissue engineering and their interaction with mouse fibroblast L929 In Vitro // *Journal of Bionanoscience*. 2017. V. 11. N 3. C. 233–240. <https://doi.org/10.1166/jbns.2017.1431>
7. Ferreira C.R.D., Santiago A.A.G., Vasconcelos R.C., Paiva D.F.F., Pirih F.Q., Araújo A.A., Motta F.V., Bomio M.R.D. Study of microstructural, mechanical, and biomedical properties of zirconia/hydroxyapatite ceramic composites // *Ceramics International*. 2022. V. 48. N 9. P. 12376–12386. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.01.102>
8. Lahiri D., Singh V., Keshri A.K., Seal S., Agarwal A. Carbon nanotube toughened hydroxyapatite by spark plasma sintering: microstructural evolution and multiscale tribological properties // *Carbon*. 2010. V. 48. N 11. P. 3103–3120. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2010.04.047>
9. Mukherjee S., Kundu B., Chanda A., Sen S. Effect of functionalisation of CNT in the preparation of HAP–CNT biocomposites // *Ceramics international*. 2015. V. 41. N 3. Part A. P. 3766–3774. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.11.052>
10. Henriques B., Fabris D., Lopes E., Moreira A.C., Mantovani I.F., Fernandes C.P., Fredel M.C. Influence of the addition of Ni-coated carbon nanotubes on the mechanical properties of highly porous zirconia cellular structures // *Advanced Engineering Materials*. 2022. V. 24. N 1. P. 2100624. <https://doi.org/10.1002/adem.202100624>
11. Yu L., Jia P., Song Y., Zhao B., Pan Y., Wang J., Cui H., Feng R., Li H., Cui X., Gao Z., Fang X., Zhang L. Effect of carbon nanotubes on the microstructure and properties of plasma electrolytic oxidized ceramic coatings on high silicon aluminum alloy // *Journal of Materials Research and Technology*. 2022. V. 18. P. 3541–3552. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.04.035>
12. Thirugnanasambantham K.G., Sankaramoorthy T., Karthikeyan R., Kumar K.S. A comprehensive review: Influence of the concentration of carbon nanotubes (CNT) on mechanical characteristics of aluminium metal matrix composites: Part 1 // *Materials Today: Proceedings*. 2021. V. 45. P. 2561–2566. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.267>
13. Kumar S.P., Selvamani S.T., Vigneshwar M., Hariharan S.J. Tensile, microhardness, and microstructural analysis on Mg–CNT nano composites // *Materials Today: Proceedings*. 2018. V. 5. N 2. Part 2. P. 7882–7888. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2017.11.469>
14. Veljović Đ., Vuković G.D., Steins I., Palcevskis E., Uskoković P., Petrović R., Janačković Đ. Improvement of the mechanical properties of spark plasma sintered hap bioceramics by decreasing the grain size and by adding multi-walled carbon nanotubes // *Science of Sintering*. 2013. V. 45. N 2. P. 233–243. <https://doi.org/10.2298/sos1302233v>
15. Currey J.D. Mechanical properties of bone tissues with greatly differing functions // *Journal of Biomechanics*. 1979. V. 12. N 4. P. 313–319. [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(79\)90073-3](https://doi.org/10.1016/0021-9290(79)90073-3)
16. Okamoto M., Dohi Y., Ohgushi H., Shimaoka H., Ikeuchi M., Matsushima A., Yonemasu K., Hosoi H. Influence of the porosity of hydroxyapatite ceramics on in vitro and in vivo bone formation by cultured rat bone marrow stromal cells // *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*. 2006. V. 17. N 4. P. 327–336. <https://doi.org/10.1007/s10856-006-8232-z>
17. Imbeni V., Kruzic J.J., Marshall G.W., Marshall S.J., Ritchie R.O. The dentin–enamel junction and the fracture of human teeth // *Nature Materials*. 2005. V. 4. N 3. P. 229–232. <https://doi.org/10.1038/nmat1323>
18. Nastic A., Merati A., Bielawski M., Bolduc M., Fakolujo O., Nganbe M. Instrumented and Vickers indentation for the characterization of stiffness, hardness and toughness of zirconia toughened Al₂O₃ and SiC armor // *Journal of Materials Science and Technology*. 2015. V. 31. N 8. P. 773–783. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2015.06.005>
3. Gu Y.W., Loh N.H., Khor K.A., Tor S.B., Cheang P. Spark plasma sintering of hydroxyapatite powders. *Biomaterials*, 2002, vol. 23, no. 1, pp. 37–43. [https://doi.org/10.1016/S0142-9612\(01\)00076-X](https://doi.org/10.1016/S0142-9612(01)00076-X)
4. White A.A., Best S.M., Kinloch I.A. Hydroxyapatite–carbon nanotube composites for biomedical applications: a review. *International Journal of Applied Ceramic Technology*, 2007, vol. 4, no. 1, pp. 1–13. <https://doi.org/10.1111/j.1744-7402.2007.02113.x>
5. Zhao X., Zheng J., Zhang W., Chen X., Gui Z. Preparation of silicon coated-carbon fiber reinforced HA bio-ceramics for application of load-bearing bone. *Ceramics International*, 2020, vol. 46, no. 6, pp. 7903–7911. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.12.010>
6. Khalid P., Suman V.B. Carbon nanotube-hydroxyapatite composite for bone tissue engineering and their interaction with mouse fibroblast L929 In Vitro. *Journal of Bionanoscience*, 2017, vol. 11, no. 3, pp. 233–240. <https://doi.org/10.1166/jbns.2017.1431>
7. Ferreira C.R.D., Santiago A.A.G., Vasconcelos R.C., Paiva D.F.F., Pirih F.Q., Araújo A.A., Motta F.V., Bomio M.R.D. Study of microstructural, mechanical, and biomedical properties of zirconia/hydroxyapatite ceramic composites. *Ceramics International*, 2022, vol. 48, no. 9, pp. 12376–12386. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.01.102>
8. Lahiri D., Singh V., Keshri A.K., Seal S., Agarwal A. Carbon nanotube toughened hydroxyapatite by spark plasma sintering: microstructural evolution and multiscale tribological properties. *Carbon*, 2010, vol. 48, no. 11, pp. 3103–3120. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2010.04.047>
9. Mukherjee S., Kundu B., Chanda A., Sen S. Effect of functionalisation of CNT in the preparation of HAP–CNT biocomposites. *Ceramics international*, 2015, vol. 41, no. 3, part A, pp. 3766–3774. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.11.052>
10. Henriques B., Fabris D., Lopes E., Moreira A.C., Mantovani I.F., Fernandes C.P., Fredel M.C. Influence of the addition of Ni-coated carbon nanotubes on the mechanical properties of highly porous zirconia cellular structures. *Advanced Engineering Materials*, 2022, vol. 24, no. 1, pp. 2100624. <https://doi.org/10.1002/adem.202100624>
11. Yu L., Jia P., Song Y., Zhao B., Pan Y., Wang J., Cui H., Feng R., Li H., Cui X., Gao Z., Fang X., Zhang L. Effect of carbon nanotubes on the microstructure and properties of plasma electrolytic oxidized ceramic coatings on high silicon aluminum alloy. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, vol. 18, pp. 3541–3552. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.04.035>
12. Thirugnanasambantham K.G., Sankaramoorthy T., Karthikeyan R., Kumar K.S. A comprehensive review: Influence of the concentration of carbon nanotubes (CNT) on mechanical characteristics of aluminium metal matrix composites: Part 1. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 45, pp. 2561–2566. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.267>
13. Kumar S.P., Selvamani S.T., Vigneshwar M., Hariharan S.J. Tensile, microhardness, and microstructural analysis on Mg–CNT nano composites. *Materials Today: Proceedings*, 2018, vol. 5, no. 2, part 2, pp. 7882–7888. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2017.11.469>
14. Veljović Đ., Vuković G.D., Steins I., Palcevskis E., Uskoković P., Petrović R., Janačković Đ. Improvement of the mechanical properties of spark plasma sintered hap bioceramics by decreasing the grain size and by adding multi-walled carbon nanotubes. *Science of Sintering*, 2013, vol. 45, no. 2, pp. 233–243. <https://doi.org/10.2298/sos1302233v>
15. Currey J.D. Mechanical properties of bone tissues with greatly differing functions. *Journal of Biomechanics*, 1979, vol. 12, no. 4, pp. 313–319. [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(79\)90073-3](https://doi.org/10.1016/0021-9290(79)90073-3)
16. Okamoto M., Dohi Y., Ohgushi H., Shimaoka H., Ikeuchi M., Matsushima A., Yonemasu K., Hosoi H. Influence of the porosity of hydroxyapatite ceramics on in vitro and in vivo bone formation by cultured rat bone marrow stromal cells. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 2006, vol. 17, no. 4, pp. 327–336. <https://doi.org/10.1007/s10856-006-8232-z>
17. Imbeni V., Kruzic J.J., Marshall G.W., Marshall S.J., Ritchie R.O. The dentin–enamel junction and the fracture of human teeth. *Nature Materials*, 2005, vol. 4, no. 3, pp. 229–232. <https://doi.org/10.1038/nmat1323>
18. Nastic A., Merati A., Bielawski M., Bolduc M., Fakolujo O., Nganbe M. Instrumented and Vickers indentation for the characterization of stiffness, hardness and toughness of zirconia toughened Al₂O₃ and SiC armor. *Journal of Materials Science and Technology*, 2015, vol. 31, no. 8, pp. 773–783. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2015.06.005>

19. Пашков Д.М., Беляк О.А., Гуда А.А., Колесников В.И. Обратное проектирование механических и трибологических свойств покрытий: результаты алгоритмов машинного обучения // Физическая мезомеханика. 2022. Т. 25. № 2. С. 24–34. https://doi.org/10.55652/1683-805X_2022_25_2_24
20. Abueidha D.W., Almasri M., Ammourah R., Ravaioli U., Jasiuk I.M., Sobh N.A. Prediction and optimization of mechanical properties of composites using convolutional neural networks // Composite Structures. 2019. V. 227. P. 111264. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111264>
21. DeVore R., Hanin B., Petrova G. Neural network approximation // Acta Numerica. 2021. V. 30. P. 327–444. <https://doi.org/10.1017/s0962492921000052>
22. Li Y., Li H., Jin C., Shen J. The study of effect of carbon nanotubes on the compressive strength of cement-based materials based on machine learning // Construction and Building Materials. 2022. V. 358. P. 129435. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129435>
23. Akbari P., Zamani M., Mostafaei A. Machine learning prediction of mechanical properties in metal additive manufacturing // Additive Manufacturing. 2024. V. 91. P. 104320. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2024.104320>
24. Golkarnarenji G., Naebe M., Badii K., Milani A.S., Jazar R.N., Khayyam H. A machine learning case study with limited data for prediction of carbon fiber mechanical properties // Computers in Industry. 2019. V. 105. P. 123–132. <https://doi.org/10.1016/j.compind.2018.11.004>
25. Краснов Ф.В. Выявление ошибок разметки данных с помощью моделей классификации для небольших наборов данных // International Journal of Open Information Technologies. 2023. Т. 11. № 5. С. 54–62.
26. Xu P., Ji X., Li M., Lu W. Small data machine learning in materials science // npj Computational Materials. 2023. V. 9. N 1. P. 42. <https://doi.org/10.1038/s41524-023-01000-z>
27. Karamov R., Akhatov I., Sergeichev I.V. Prediction of fracture toughness of pultruded composites based on supervised machine learning // Polymers. 2022. V. 14. N 17. P. 3619. <https://doi.org/10.3390/polym14173619>
28. Şimşek Türker Y., Kilinçarslan S., Yilmaz Ince E. Performance of ANN, Random Forest and XGBoost methods in predicting the flexural properties of wood beams reinforced with carbon-FRP // Wood Material Science and Engineering. 2025. V. 20. N 3. P. 657–668. <https://doi.org/10.1080/17480272.2024.2370942>
29. Han T., Huang J., Sant G., Neithalath N., Kumar A. Predicting mechanical properties of ultrahigh temperature ceramics using machine learning // Journal of the American Ceramic Society. 2022. V. 105. N 11. P. 6851–6863. <https://doi.org/10.1111/jace.18636>
30. Shah V., Zadourian S., Yang C., Zhang Z., Gu, G.X. Data-driven approach for the prediction of mechanical properties of carbon fiber reinforced composites // Materials Advances. 2022. V. 3. N 19. P. 7319–7327. <https://doi.org/10.1039/d2ma00698g>
31. Carneiro M.V., Salis T.T., Almeida G.M., Braga A.P. Prediction of mechanical properties of steel tubes using a machine learning approach // Journal of Materials Engineering and Performance. 2021. V. 30. N 1. P. 434–443. <https://doi.org/10.1007/s11665-020-05345-0>
32. Zhang Z., Mansouri Tehrani A., Oliynyk A.O., Day B., Brgoch J. Finding the next superhard material through ensemble learning // Advanced Materials. 2021. V. 33. N 5. P. 2005112. <https://doi.org/10.1002/adma.202005112>
33. Dovale-Farelo V., Tavadze P., Lang L., Bautista-Hernandez A., Romero A.H. Vickers hardness prediction from machine learning methods // Scientific Reports. 2022. V. 12. N 1. P. 22475. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-26729-3>
34. Qadir A., Ali S., Dusza J., Rafaja D. Predicting hardness of graphene-added Si₃N₄ using machine learning: A data-driven approach // Open Ceramics. 2024. V. 19. P. 100634. <https://doi.org/10.1016/j.oceram.2024.100634>
35. Barabashko M.S., Tkachenko M.V., Neiman A.A., Ponomarev A.N., Rezvanova A.E. Variation of Vickers microhardness and compression strength of the bioceramics based on hydroxyapatite by adding the multi-walled carbon nanotubes // Applied Nanoscience. 2020. V. 10. N 8. P. 2601–2608. <https://doi.org/10.1007/s13204-019-01019-z>
36. Barabashko M., Ponomarev A., Rezvanova A., Kuznetsov V., Moseenkov S. Young's modulus and vickers hardness of the hydroxyapatite bioceramics with a small amount of the multi-walled carbon nanotubes // Materials. 2022. V. 15. N 15. P. 5304. <https://doi.org/10.3390/ma15155304>
19. Pashkov D.M., Belyak O.A., Guda A.A., Kolesnikov V.I. Reverse engineering of mechanical and tribological properties of coatings: results of machine learning algorithms. *Physical Mesomechanics*, 2022, vol. 25, no. 4, pp. 296–305. <https://doi.org/10.1134/s1029959922040038>
20. Abueidha D.W., Almasri M., Ammourah R., Ravaioli U., Jasiuk I.M., Sobh N.A. Prediction and optimization of mechanical properties of composites using convolutional neural networks. *Composite Structures*, 2019, vol. 227, pp. 111264. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111264>
21. DeVore R., Hanin B., Petrova G. Neural network approximation. *Acta Numerica*, 2021, vol. 30, pp. 327–444. <https://doi.org/10.1017/s0962492921000052>
22. Li Y., Li H., Jin C., Shen J. The study of effect of carbon nanotubes on the compressive strength of cement-based materials based on machine learning. *Construction and Building Materials*, 2022, vol. 358, pp. 129435. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129435>
23. Akbari P., Zamani M., Mostafaei A. Machine learning prediction of mechanical properties in metal additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, 2024, vol. 91, pp. 104320. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2024.104320>
24. Golkarnarenji G., Naebe M., Badii K., Milani A.S., Jazar R.N., Khayyam H. A machine learning case study with limited data for prediction of carbon fiber mechanical properties. *Computers in Industry*, 2019, vol. 105, pp. 123–132. <https://doi.org/10.1016/j.compind.2018.11.004>
25. Krasnov F.V. Identifying data labeling errors using classification models for small datasets. *International Journal of Open Information Technologies*, 2023, vol. 11, no. 5, pp. 54–62. (in Russian)
26. Xu P., Ji X., Li M., Lu W. Small data machine learning in materials science. *npj Computational Materials*, 2023, vol. 9, no. 1, pp. 42. <https://doi.org/10.1038/s41524-023-01000-z>
27. Karamov R., Akhatov I., Sergeichev I.V. Prediction of fracture toughness of pultruded composites based on supervised machine learning. *Polymers*, 2022, vol. 14, no. 17, pp. 3619. <https://doi.org/10.3390/polym14173619>
28. Şimşek Türker Y., Kilinçarslan S., Yilmaz Ince E. Performance of ANN, Random Forest and XGBoost methods in predicting the flexural properties of wood beams reinforced with carbon-FRP. *Wood Material Science and Engineering*, 2025, vol. 20, no. 3, pp. 657–668. <https://doi.org/10.1080/17480272.2024.2370942>
29. Han T., Huang J., Sant G., Neithalath N., Kumar A. Predicting mechanical properties of ultrahigh temperature ceramics using machine learning. *Journal of the American Ceramic Society*, 2022, vol. 105, no. 11, pp. 6851–6863. <https://doi.org/10.1111/jace.18636>
30. Shah V., Zadourian S., Yang C., Zhang Z., Gu, G.X. Data-driven approach for the prediction of mechanical properties of carbon fiber reinforced composites. *Materials Advances*, 2022, vol. 3, no. 19, pp. 7319–7327. <https://doi.org/10.1039/d2ma00698g>
31. Carneiro M.V., Salis T.T., Almeida G.M., Braga A.P. Prediction of mechanical properties of steel tubes using a machine learning approach. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2021, vol. 30, no. 1, pp. 434–443. <https://doi.org/10.1007/s11665-020-05345-0>
32. Zhang Z., Mansouri Tehrani A., Oliynyk A.O., Day B., Brgoch J. Finding the next superhard material through ensemble learning. *Advanced Materials*, 2021, vol. 33, no. 5, pp. 2005112. <https://doi.org/10.1002/adma.202005112>
33. Dovale-Farelo V., Tavadze P., Lang L., Bautista-Hernandez A., Romero A.H. Vickers hardness prediction from machine learning methods. *Scientific Reports*, 2022, vol. 12, no. 1, pp. 22475. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-26729-3>
34. Qadir A., Ali S., Dusza J., Rafaja D. Predicting hardness of graphene-added Si₃N₄ using machine learning: A data-driven approach. *Open Ceramics*, 2024, vol. 19, pp. 100634. <https://doi.org/10.1016/j.oceram.2024.100634>
35. Barabashko M.S., Tkachenko M.V., Neiman A.A., Ponomarev A.N., Rezvanova A.E. Variation of Vickers microhardness and compression strength of the bioceramics based on hydroxyapatite by adding the multi-walled carbon nanotubes. *Applied Nanoscience*, 2020, vol. 10, no. 8, pp. 2601–2608. <https://doi.org/10.1007/s13204-019-01019-z>
36. Barabashko M., Ponomarev A., Rezvanova A., Kuznetsov V., Moseenkov S. Young's modulus and vickers hardness of the hydroxyapatite bioceramics with a small amount of the multi-walled carbon nanotubes. *Materials*, 2022, vol. 15, no. 15, pp. 5304. <https://doi.org/10.3390/ma15155304>

37. Шутитов Р.А., Мызь А.Л., Кузнецов В.Л., Карагедов Г.Р. Токопроводящие керамические композиты на основе Al_2O_3 , модифицированные многослойными углеродными нанотрубками // Перспективные материалы. 2016. № 8. С. 64–73.
38. Сидоренко Д.А., Зайцев А.А., Курбаткина В.В., Левашов Е.А., Андреев В.А., Рупасов С.И., Севастьянов П.И. Влияние добавок углеродных нанотрубок на структуру и свойства металлических связок для алмазного инструмента // Известия высших учебных заведений. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2012. № 1. С. 38–43.
- carbon nanotubes. *Materials*, 2022, vol. 15, no. 15, pp. 5304. <https://doi.org/10.3390/ma15155304>
37. Shutilov R., Myz A., Kuznetsov V., Karagedov G. Current conductive Al_2O_3 ceramic composites modified by multiwall carbon nanotubes. *Perspektivnye Materialy*, 2016, no. 8, pp. 64–73. (in Russian)
38. Sidorenko D.A., Zaitsev A.A., Kurbatkina V.V., Levashov E.A., Anreyev V.A., Rupasov S.I., Sevastianov P.I. The effect of carbon nanotube additives on structure and properties of metal binders for diamond cutting tools. *Powder Metallurgy and Functional Coatings*, 2012, no. 1, pp. 38–43. (in Russian)

Авторы

Резванова Анастасия Евгеньевна — младший научный сотрудник, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, 634055, Российская Федерация, [sc 57199302281](https://orcid.org/0000-0002-7067-7979), <https://orcid.org/0000-0002-7067-7979>, ranast@ispms.ru

Кудряшов Борис Сергеевич — аспирант, инженер-исследователь, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, 634055, Российская Федерация, [sc 57656690100](https://orcid.org/0009-0000-5133-4893), <https://orcid.org/0009-0000-5133-4893>, bsk3@ispms.ru

Погудин Владимир Юрьевич — инженер, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, 634055, Российская Федерация; студент, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, 634050, Российская Федерация, <https://orcid.org/0009-0002-7191-163X>, pogudin.vova@bk.ru

Authors

Anastasiya E. Rezvanova — Junior Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, 634055, Russian Federation, [sc 57199302281](https://orcid.org/0000-0002-7067-7979), <https://orcid.org/0000-0002-7067-7979>, ranast@ispms.ru

Boris S. Kudryashov — PhD Student, Engineer-Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, 634055, Russian Federation, [sc 57656690100](https://orcid.org/0009-0000-5133-4893), <https://orcid.org/0009-0000-5133-4893>, bsk3@ispms.ru

Vladimir Yu. Pogudin — Engineer, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, 634055, Russian Federation; Student, Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, 634050, Russian Federation, <https://orcid.org/0009-0002-7191-163X>, pogudin.vova@bk.ru

Статья поступила в редакцию 28.07.2025

Одобрена после рецензирования 03.10.2025

Принята к печати 23.11.2025

Received 28.07.2025

Approved after reviewing 03.10.2025

Accepted 23.11.2025



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»