

Ю. Г. Ковальов, доц., канд. тех. наук, С. Г. Ковальов, канд. пед. наук, І. Р. Євменсьов
Центральноукраїнський національний технічний університет, м. Кропивницький, Україна
e-mail: yukovalyov@ukr.net

Машинне навчання як інструмент уточнення моделей дифузійного спікання кераміки Al_2O_3

У статті досліджено адаптацію класичних моделей дифузійного спікання Al_2O_3 за допомогою машинного навчання. Шляхом оптимізації параметрів класичних рівнянь ($n=2$, $Q=451$ кДж/кг) вдалося суттєво знизити похибку розрахунків. Найкращі результати показав алгоритм Random Forest Regressor ($R^2=0,91$), який враховує нелінійні ефекти та мінімізує відхилення до 1,74 мкм. Поєднання фізики дифузії з машинним навчанням дозволяє створювати надійні цифрові двійники для керування структурою кераміки.

індустрія 4.0, спікання, кінетика дифузії, машинне навчання, модель

Постановка проблеми. Широке застосування кераміки на основі Al_2O_3 у стратегічних галузях зумовлює жорсткі вимоги до її фізико-механічних характеристик, які безпосередньо залежать від параметрів мікроструктури. Ключовим етапом формування цих властивостей є спікання, проте традиційний аналітичний апарат (моделі Кобла, Кінжері тощо) дедалі частіше виявляється недостатньо точним. Це зумовлено ідеалізацією вихідних умов – припущеннями про сферичність частинок та ізотермічність процесів, що суперечить реальній кінетиці ущільнення полідисперсних порошків. Як наслідок, виникає невідповідність між теоретичними прогнозами та практичними результатами, зокрема через нелінійний вплив домішок і температурні градієнти, що провокує появу структурних дефектів. Таким чином, існує потреба у розробці адаптивних моделей, здатних враховувати реальні чинники еволюції зерен для забезпечення стабільної якості керамічних виробів.

У контексті концепції Industry 4.0 традиційні методики розрахунку вичерпали свій потенціал щодо точності, оскільки жорстка структура степеневих законів класичної фізики не здатна повноцінно описувати зміну енергії активації та нелінійні ефекти під час термічної обробки. Це актуалізує впровадження інтелектуальних алгоритмів, зокрема методів машинного навчання, як інструменту для створення предиктивних моделей нового покоління. Використання ансамблевих методів регресії дозволяє виявити приховані закономірності в експериментальних даних та інтегрувати їх у фізико-хімічну модель процесів дифузії. Розробка таких цифрових двійників є критично важливою для автоматизованого підбору режимів спікання, що забезпечують формування високощільної дрібнозернистої структури Al_2O_3 із заданим комплексом експлуатаційних властивостей.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Питання кінетики спікання оксидних систем традиційно розглядаються крізь призму класичних дифузійних моделей, детально описаних у фундаментальних працях [1–3]. Проте сучасна наукова література свідчить про поступовий відхід від суто аналітичних методів на користь експериментально орієнтованих підходів. Зокрема, протягом 2018–2025 років значна увага дослідників зосереджена на альтернативних методах спікання, що дозволяють обійти обмеження класичного термічного нагріву.

Серед найбільш перспективних напрямів виділяють технології холодного спікання (CSP) та надшвидкого високотемпературного синтезу (UHS), які мінімізують час перебування матеріалу при критичних температурах [4–6]. Окрему нішу займає електроімпульсне спікання (SPS/FAST), де накладання зовнішніх полів дозволяє досягати теоретичної щільності кераміки при значному зниженні енерговитрат. Ці роботи демонструють, що управління мікроструктурою можливе навіть за умов екстремально високих швидкостей нагріву, які класичні рівняння описують лише приблизно.

Паралельно із технологічними інноваціями розвивається напрям цифрової трансформації матеріалознавства. Останні публікації підтверджують ефективність гібридизації фізичних моделей із методами інтелектуального аналізу даних [7]. Дослідники все частіше використовують регресійні алгоритми для корекції емпіричних коефіцієнтів у реальному часі. Проте, попри наявність окремих рішень у сфері предиктивного аналізу, питання створення універсальних цифрових двійників для Al_2O_3 , здатних точно прогнозувати ріст зерен на основі ансамблевих алгоритмів, залишається недостатньо висвітленим. Саме ця невідповідність у науковому знанні зумовлює необхідність поєднання класичної фізики дифузії з інструментарієм машинного навчання, на що й направлено дослідження даної роботи.

Постановка завдання. Мета роботи полягає у мінімізації похибок характеристик мікроструктури кераміки Al_2O_3 шляхом інтеграції фундаментальних закономірностей зміни параметрів дифузійного спікання з інструментарієм інтелектуального аналізу даних.

Для реалізації поставленої мети було визначено такі завдання:

- проаналізувати фізичну природу процесів твердофазного ущільнення та теоретичні засади ступеневих законів рекристалізації;
- сформувані структурований масив експериментальних показників (температурно-часові режими, динаміка зміни розміру зерен) на основі верифікованих джерел;
- виконати розрахунок кінетичних параметрів (енергії активації та показника росту) згідно з класичними лінеаризованими залежностями Арреніуса;
- побудувати та верифікувати регресійну модель предиктивного аналізу, здатну враховувати нелінійні фактори впливу на ріст зерен кераміки;
- здійснити порівняльну оцінку точності аналітичного та машинного підходів, встановивши межі їхнього ефективного застосування.

При виконанні завдань було використано наступні методи дослідження:

- аналіз термодинамічних параметрів та дифузійних механізмів на основі класичних теорій Кобла та Кінжері;
- метод найменших квадратів (МНК) для лінеаризації рівнянь Арреніуса та визначення базових констант (Q , n);
- регресійний аналіз, поліноміальна апроксимація та алгоритм Random Forest Regressor для моделювання багатофакторних залежностей;
- оцінка достовірності моделей за допомогою метрик: R^2 (коефіцієнт детермінації) та MAE (середня абсолютна похибка);
- методи побудови графіків, таблиць та карт властивостей для наочного представлення залежностей.

Чисельна реалізація розробленої моделі виконана мовою Python 3.10 у середовищі Google Colab з використанням бібліотек інтелектуального аналізу даних Scikit-learn та Pandas.

Виклад основного матеріалу. Твердофазне спікання залишається домінуючим методом консолідації технічної кераміки, охоплюючи до 70% ринку

високотехнологічних виробів. Процес структурування матеріалу традиційно поділяють на три послідовні стадії, кожна з яких визначається специфічними механізмами дифузії.

На початковому етапі внаслідок поверхневого масопереносу формуються первинні міжчастинкові контакти, що забезпечує цілісність пресовки без суттєвої усадки. Проміжна стадія характеризується інтенсивним ущільненням (до 90–95% від теоретичної щільності) внаслідок об'ємної та межової дифузії, що супроводжується ізоляцією пор. На завершальній стадії відбувається остаточне витіснення пористості та рекристалізація. Саме тут критичного значення набуває контроль кінетики росту зерен, оскільки неконтрольоване укрупнення кристалітів може нівелювати отримані механічні переваги.

Теоретичне описання цих процесів базується на фундаментальних працях В. Кінжері [1] та Р. Кобла [2], які характеризують взаємодоповнюючі фази ущільнення, де кожна описує свій критичний проміжок часу. Модель Кінжері сфокусована на кінетиці розвитку міжчастинкових контактів на ранніх етапах, тоді як підхід Кобла спрямований на формалізацію механізмів дифузійного ущільнення та еволюцію зернистої структури на завершальних стадіях.

Еволюція зернистості структури кераміки є визначальним чинником у формуванні комплексу експлуатаційних характеристик готового виробу. Фізичним рушієм цього процесу виступає міграція міжкристалітних меж, спрямована на мінімізацію надлишкової поверхневої енергії системи. У класичному матеріалознавстві кінетика укрупнення кристалітів формалізується через ізотермічні залежності розміру зерна від тривалості витримки. Теоретичним підґрунтям для такого опису слугує модель, відома як теорія Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, що встановлює фундаментальний зв'язок між дифузійним масопереносом та динамікою росту середнього радіуса зерна:

$$d^n - d_0^n = K \cdot t, \quad (1)$$

де d – середній розмір зерна після часу t ; d_0 – початковий розмір зерна, K – кінетична константа, що залежить від температури та коефіцієнта дифузії, n – показник, який визначає механізм росту. Кобл уточнює значення цього показника для кераміки: $n=2$, для абсолютно чистих матеріалів без пор; $n=3$, коли рух межі гальмується розчиненими атомами домішок; $n=4$, для випадків, коли ріст зерен стримується порами, що знаходяться на межах зерен [3, 8].

Вагомим показником, що визначає фізико-механічний профіль кераміки (зокрема її щільність, межу міцності та коефіцієнт теплопровідності), є динаміка елімінації пористості. На ранніх етапах спікання пори мають нерівноважну морфологію та локалізуються у міжчастинкових пустотах пресовки. Внаслідок термічної активації відбувається зміна їхньої форми, вони поступово стають більш схожі на сфери, потім спостерігається ізоляція та подальше зникнення, що зумовлене спрямованими дифузійними потоками атомів і міграцією кристалічних меж. Для математичного опису кінетики ущільнення на завершальних стадіях часто застосовують експоненціальну залежність, що впливає з феноменологічного аналізу дифузійних процесів:

$$P(t) = P_0 \cdot \exp(-K \cdot t), \quad (2)$$

де $P(t)$ та P_0 – поточне та вихідне значення пористості відповідно; K – кінетична константа процесу.

Остання константа інтегрує в собі вплив температурного фактору та домінуючого механізму масопереносу, підпорядковуючись, як правило, класичному рівнянню Арреніуса [9]:

$$K(t) = K_0 \cdot \exp(-Q/R \cdot T), \quad (3)$$

Ця модель показує, що зі збільшенням часу та температури пористість зменшується, наближаючи матеріал до теоретичної щільності. Механічна міцність керамічних систем перебуває у детермінованій залежності від об'ємної частки пористості, оскільки вакантні мікропростори виконують роль локальних концентраторів напружень та редукують ефективну площу поперечного перерізу, що чинить опір зовнішньому навантаженню. Зростання відносної щільності матеріалу експоненціально підвищує його триботехнічні та міцнісні характеристики.

Для кількісного опису цього взаємозв'язку традиційно застосовують рівняння Шиллера (модель Pica), яке апроксимує зміну межі міцності через степеневу функцію [10, 11]. Дана модель ілюструє високу чутливість кераміки до залишкових дефектів: навіть незначне зростання провокує суттєву деградацію міцності.

Хоча експериментальні дані роботи [12] загалом узгоджуються з тенденціями інтенсифікації росту зерен при підвищенні температури та тривалості витримки, реальна кінетика часто демонструє суттєві відхилення. Зокрема, критичною проблемою є аномальний ріст зерен, при якому вибіркоче укрупнення окремих кристалітів порушує гомогенність структури та деградує механічні властивості кераміки [13, 14]. Такі стохастичні процеси важко описуються детермінованими рівняннями, що зумовлює необхідність переходу від стандартних емпіричних поправок до адаптивних інтелектуальних моделей.

У сучасному матеріалознавстві дедалі більшого значення набувають методи машинного навчання (МН), які дозволяють прогнозувати властивості матеріалів на основі великих масивів даних. На відміну від класичних моделей, що ґрунтуються на спрощених аналітичних рівняннях, дані підходи здатні враховувати багатофакторний вплив параметрів процесу – температуру, тиск, час спікання, склад та мікроструктурні особливості.

Основна ідея полягає у використанні відкритих баз даних (Materials Project, AFLOW тощо), де зібрано інформацію про структуру, склад і властивості тисяч матеріалів. На основі цих даних формуються ознаки, що описують матеріал: атомні радіуси, густина, пористість тощо. Далі застосовуються алгоритми машинного навчання – регресійні моделі, ансамблеві методи (Random Forest, Gradient Boosting), нейронні мережі або графові нейронні мережі [15-17].

Данні для аналізу, які були використанні у цьому дослідженні, наведені в таблиці 1 і взяті з джерела [12].

Таблиця 1 – Експериментальні дані параметрів для розрахунків

Температура (К)	Час (с)	d_0 (мкм)	d (мкм)	MgO (ppm)
1673	3600	1,2	2,8	0
1673	14400	1,2	4,5	0
1673	36000	1,2	6,8	0
1773	3600	1,2	5,5	0
1773	14400	1,2	11,2	0
1773	36000	1,2	18,4	0
1873	3600	1,2	12,5	0
1873	18000	1,2	28,0	0
1673	3600	1,2	1,5	250
1773	3600	1,2	2,4	250
1873	3600	1,2	4,8	250

Джерело: [12]

Для лінеаризації рівнянь Арреніуса та визначення базових констант (Q , n), рівняння (1), з урахуванням (3), представимо у вигляді:

$$d^n - d_0^n = K_0 \cdot \exp((-Q/R \cdot T) \cdot t) \quad (4)$$

$$\ln(d) = (1/n) \ln(t) + \text{const} \quad (5)$$

Рівняння (5) є справедливим за умови ізотермічної витримки ($T = \text{const}$) та значного перевищення поточного розміру зерен над початковим ($d \gg d_0$). Застосування методу найменших квадратів до вказаної залежності у логарифмічних координатах $\ln(d) - \ln(t)$, дозволяє розрахувати фактичний показник степеня n для конкретної системи, що може відрізнятися від теоретично передбаченого значення $n=3$.

Після логарифмування рівняння (4), маємо:

$$\ln\left(\frac{d^n - d_0^n}{t}\right) = \ln(K_0) \cdot \left(-\frac{Q}{RT}\right). \quad (6)$$

Застосування методу найменших квадратів до вказаної залежності у відповідних логарифмічних координатах дозволяє отримати значення Q . Для наших даних застосування методу найменших квадратів дозволило встановити, що кутовий коефіцієнт нахилу апроксимуючої прямої (5) становить 0,52. Відповідно, отримане значення показника степеня є близьким до теоретичного $n=2$, за умови домінування механізму об'ємної дифузії, як лімітуючої стадії росту зерен у досліджуваній системі. Розрахована енергія активації процесу складає $Q=451$ кДж/моль, що добре узгоджується з типовими літературними даними для оксиду алюмінію.

На рис. 1 представлено результати порівняльного аналізу точності прогнозування з використанням метрик R^2 та MAE. Порівняння проведено для базової моделі Кобла з традиційними параметрами ($n=3$ та $Q=395$ кДж/моль) та розробленої моделі машинного навчання. На рис. 2 відображено аналогічні статистичні показники для уточненої класичної моделі, параметри якої ($n=2$ та $Q=451$ кДж/моль) були розраховані в межах даної роботи, у зіставленні з результатами інтелектуального аналізу даних.

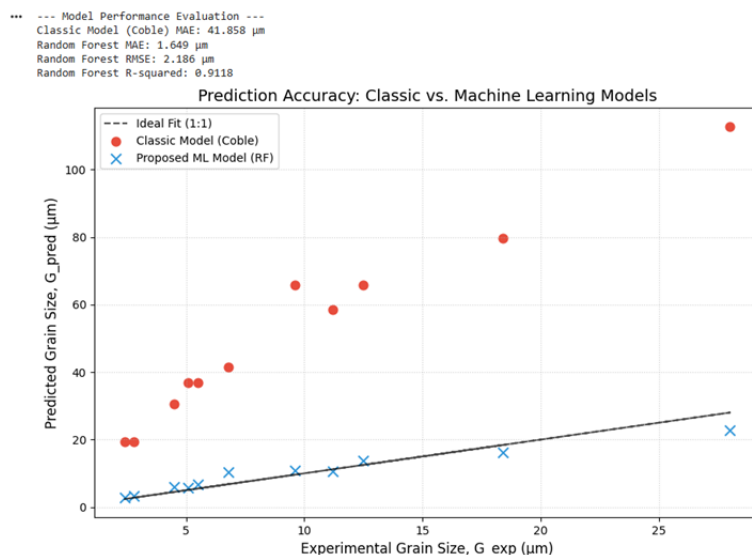


Рисунок 1 – Порівняння класичної моделі та машинного навчання

Джерело: розроблено авторами

Для верифікації отриманих результатів та визначення домінуючих факторів впливу проведено оцінку важливості ознак алгоритму Random Forest (рис. 3). Це

дозволило кількісно оцінити роль температури, часу та домішок у процесах еволюції мікроструктури.

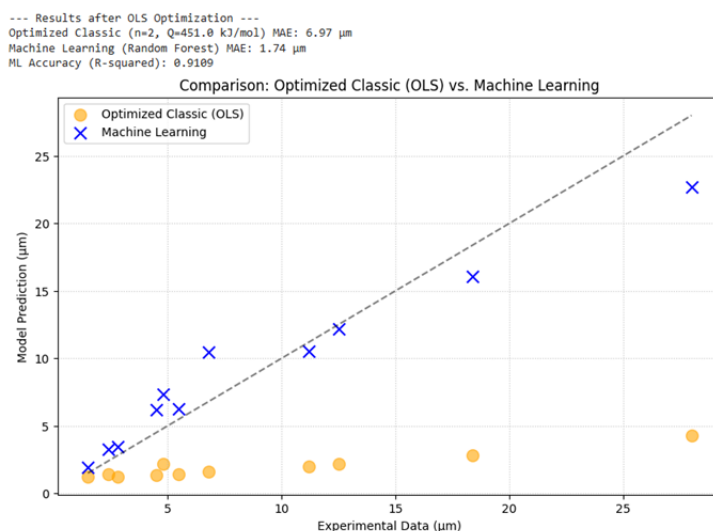


Рисунок 2 – Порівняння оптимізованої класичної моделі та машинного навчання

Джерело: розроблено авторами

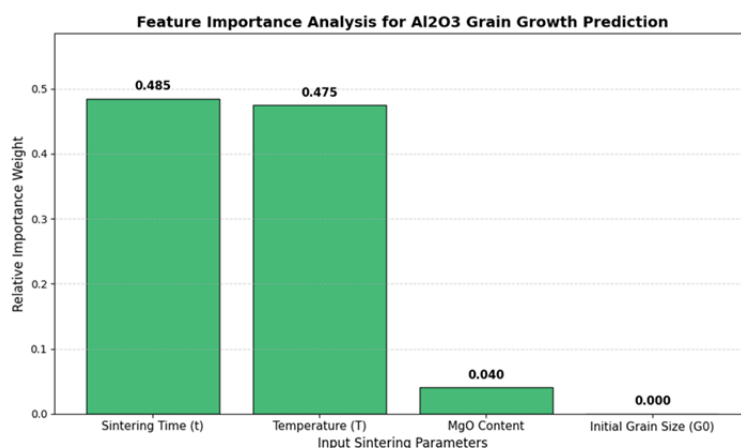


Рисунок 3 – Результати Random Forest Regressor

Джерело: розроблено авторами

Результати проведеного аналізу дозволяють сформулювати такі висновки:

– Апробація традиційної моделі Кобла із загальноприйнятими константами ($n=3$, $Q=395$ кДж/кг) виявила її неспроможність забезпечити адекватну точність прогнозу. Систематичне завищення розрахункових значень розміру зерна призвело до значної похибки (41,9 мкм), що свідчить про неможливість прямого перенесення табличних параметрів на досліджувану систему.

– Шляхом оптимізації моделі методом найменших квадратів було встановлено уточнені параметри ($n=2$, $Q=451$ кДж/кг). Це дозволило скоротити середню абсолютну похибку до 6,97 мкм (майже ушестеро), підтверджуючи, що запропоновані в роботі константи значно краще описують кінетику росту зерна в обраних умовах.

– Водночас навіть адаптована модель Кобла зберігає певну нелінійну неточність, схильючись до зниження показників при збільшенні реального розміру зерен. Таке відхилення вказує на обмеженість жорсткої математичної структури класичних рівнянь, які не здатні повною мірою охопити багатофакторну динаміку процесу.

– Найвищу прецизійність продемонстрував алгоритм машинного навчання Random Forest. Прогнози цієї моделі характеризуються мінімальною дисперсією відносно лінії ідеальної відповідності, що доводить перевагу методів МН над аналітичними варіаціями у питаннях апроксимації складних експериментальних залежностей.

Висновки.

1. Доведено неспроможність детермінованої моделі Кобла у прогнозуванні реальних показників мікроструктури: зафіксована середня абсолютна похибка (MAE=41,9 мкм) фактично перевищує діапазон досліджуваних значень (1–30 мкм). Така значна невідповідність пояснюється негнучкістю класичних фізичних констант, які не враховують нелінійний характер кінетики у складних багатокомпонентних порошкових системах.

2. Встановлено, що застосування алгоритму Random Forest дозволяє радикально підвищити точність моделювання, знизивши похибку у 25 разів (MAE=1,65 мкм) при високому рівні апроксимації ($R^2=0,91$). Це підтверджує ефективність методів інтелектуального аналізу даних як інструменту нівелювання ідеалізованих припущень, властивих класичній фізиці кераміки.

3. Науково обґрунтовано можливість зниження енерговитрат на 10–15% за рахунок оптимізації режимів спікання. Завдяки високій прогностичній здатності моделі машинного навчання стає можливим замінити енергоємні пікові температури тривалою ізотермічною витримкою при нижчих показниках. Точне визначення точки насичення ущільнення дозволяє уникнути надлишкового перегріву, який зазвичай закладається в технологічний процес для компенсації розрахункових похибок.

5. Розроблений програмний алгоритм пропонується як основа для створення цифрових двійників у виробництві керамічних матеріалів. Впровадження цієї системи забезпечить прецизійний контроль розміру зерна кераміки та високу щільність матеріалу при суттєвому скороченні витрат на етапі розробки та оптимізації використання енергоресурсів.

Список літератури

1. Kingery W. D., Bowen H. K., Uhlmann D. R. Introduction to Ceramics. 2nd ed. New York : John Wiley & Sons, 1976. 1032 p.
2. Coble R. L. Sintering Crystalline Solids. II. Experimental Test of Diffusion Models in Powder Compacts. *Journal of Applied Physics*. 1961. Vol. 32, No. 5. P. 793–799.
3. Rahaman M. N. Ceramic Processing and Sintering. 2nd ed. New York : Marcel Dekker, 2003. 875 p.
4. Cold Sintering: Progress, Challenges, and Future Opportunities / J. Guo et al. *Annual Review of Materials Research*. 2019. Vol. 49. P. 275–295.
5. A general method for synthesizing and sintering bulk ceramics in seconds / C. Wang et al. *Science*. 2020. Vol. 368, No. 6490. P. 521–526.
6. Biesuz M., Sglavo V. M. Flash sintering of ceramics: Issues and opportunities. *International Journal of Applied Ceramic Technology*. 2019. Vol. 16, No. 2. P. 462–472.
7. Yang Z., Li J. Machine learning and densification in sintering: A review. *Acta Materialia*. 2021. Vol. 217. Art. 114138.
8. Ashby M. F. A first report on sintering diagrams. *Acta Metallurgica*. 1974. Vol. 22, No. 3. P. 275–289.
9. German R. M. Sintering Theory and Practice. New York: Wiley, 1996. 568 p.
10. Rice R. W. Porosity of Ceramics. New York : Marcel Dekker, 1998. 560 p.
11. Schiller K. K. Strength of highly porous brittle materials. *Nature*. 1958. Vol. 181, No. 4616. P. 1147–1148.9.
12. Bennison S. J., Harmer M. P. Grain Growth Kinetics for Alumina in the Absence of a Liquid Phase. *Journal of the American Ceramic Society*. 1985. Vol. 68, No. 1. P. C-22–C-24.
13. Hillert M. On the theory of normal and abnormal grain growth. *Acta Metallurgica*. 1965. Vol. 13, No. 3. P. 227–238.
14. Brook R. J. Pore-grain boundary interactions and grain growth. *Journal of the American Ceramic Society*. 1969. Vol. 52, No. 1. P. 54–55.

15. Аулін В. В., Ковальов С. Г., Ковальов Ю. Г., Гриньків А. В. Оптимізація параметрів надійності та ефективності виробничих систем і автоматизованих ліній методами штучного інтелекту : монографія / за заг. ред. д.т.н., проф. В. В. Ауліна. Кропивницький : Видавець Лисенко В. Ф., 2026. 232 с.
16. Ковальов Ю. Г., Аулін В. В., Ковальов С. Г., Кузик О. В., Гриньків А. В. Штучний інтелект у матеріалознавчих дослідженнях: тенденції, інструменти та трансформації. *Central Ukrainian Scientific Bulletin. Technical Sciences*. 2025. Вип. 12(43), ч. II. С. 134–142.
17. Ковальов Ю. Г., Аулін В. В., Ковальов С. Г., Кузик О. В., Гриньків А. В. Цифровізація матеріалознавства й напрями використання штучного інтелекту. *Вісник ХНАДУ*. 2025. Вип. 111. С. 67–74.

References

1. Kingery, W. D., Bowen, H. K., & Uhlmann, D. R. (1976). *Introduction to Ceramics* (2nd ed.). John Wiley & Sons.
2. Coble, R. L. (1961). Sintering crystalline solids. II. Experimental test of diffusion models in powder compacts. *Journal of Applied Physics*, 32(5), 793–799.
3. Rahaman, M. N. (2003). *Ceramic Processing and Sintering* (2nd ed.). Marcel Dekker.
4. Guo, J., Floyd, R., Lowum, S., Maria, J.-P., Herisson de Beauvoir, T., Seo, J.-H., & Randall, C. A. (2019). Cold sintering: Progress, challenges, and future opportunities. *Annual Review of Materials Research*, 49, 275–295.
5. Wang, C., Ping, W., Bai, Q., Cui, H., Hensley, R., Hitz, E., Han, X., Liu, Y., Li, T., Foster, P. R., Xu, J., Lin, L., Zhao, J., Xie, H., Fu, J., Baker, B. A., Mo, Y., Viswanathan, V., & Hu, L. (2020). A general method for synthesizing and sintering bulk ceramics in seconds. *Science*, 368(6490), 521–526.
6. Biesuz, M., & Sglavo, V. M. (2019). Flash sintering of ceramics: Issues and opportunities. *International Journal of Applied Ceramic Technology*, 16(2), 462–472.
7. Yang, Z., & Li, J. (2021). Machine learning and densification in sintering: A review. *Acta Materialia*, 217, Article 114138.
8. Ashby, M. F. (1974). A first report on sintering diagrams. *Acta Metallurgica*, 22(3), 275–289.
9. German, R. M. (1996). *Sintering Theory and Practice*. Wiley.
10. Rice, R. W. (1998). *Porosity of Ceramics*. Marcel Dekker.
11. Schiller, K. K. (1958). Strength of highly porous brittle materials. *Nature*, 181(4616), 1147–1148.
12. Bennison, S. J., & Harmer, M. P. (1985). Grain growth kinetics for alumina in the absence of a liquid phase. *Journal of the American Ceramic Society*, 68(1), C-22–C-24.
13. Hillert, M. (1965). On the theory of normal and abnormal grain growth. *Acta Metallurgica*, 13(3), 227–238.
14. Brook, R. J. (1969). Pore-grain boundary interactions and grain growth. *Journal of the American Ceramic Society*, 52(1), 54–55.
15. Aulin, V. V., Kovalov, S. H., Kovalov, Yu. H., & Hryniv, A. V. (2026). *Optimization of reliability and efficiency parameters of production systems and automated lines using artificial intelligence methods: Monograph* (V. V. Aulin, Ed.). Kropyvnytskyi: Lysenko V. F. [in Ukrainian]
16. Kovalov, Yu. H., Aulin, V. V., Kovalov, S. H., Kuzyk, O. V., & Hryniv, A. V. (2025). Artificial intelligence in materials science research: trends, tools and transformations. *Central Ukrainian Scientific Bulletin. Technical Sciences*, 12(43), part II, 134–142. [in Ukrainian]
17. Kovalov, Yu. H., Aulin, V. V., Kovalov, S. H., Kuzyk, O. V., & Hryniv, A. V. (2025). Digitalization of materials science and directions of artificial intelligence use. *Bulletin of Kharkiv National Highway University*, (111), 67–74. [in Ukrainian]

Yurii Kovalov, Assoc. Prof., PhD tech. sci., **Serhii Kovalov**, PhD ped. sci., **Illia Yevmenyev**
Central Ukrainian National Technical University, Kropyvnytskyi, Ukraine

Machine Learning as a Tool for Refining Diffusion Sintering Models of Al₂O₃ Ceramics

The primary objective of this research is to evaluate the predictive accuracy of classical deterministic models versus machine learning algorithms in determining the final grain size of alumina ceramics. This study aims to identify the specific limitations of the traditional Coble model within complex powder systems and establish high-precision alternatives for microstructural control. Furthermore, the research explores the potential for energy consumption optimization by refining the thermal and kinetic parameters of the sintering process through advanced data analysis.

This study conducts a comprehensive comparative analysis between the analytical Coble model and the Random Forest ensemble learning algorithm. The initial stage involved testing the classical model with standard literature constants (n=3, Q=395 kJ/mol), which revealed significant systematic errors and overestimations. Subsequently, the deterministic model was optimized using the least squares method, adjusting physical

parameters to $n=2$ and $Q=451$ kJ/mol to better suit the experimental data. In parallel, a machine learning framework was developed and trained on experimental datasets, utilizing Mean Absolute Error (MAE) and R-squared (R^2) metrics for performance evaluation. A critical component of the work was the Feature Importance analysis, which quantified the relative impact of temperature, sintering time, and MgO dopant concentration on grain growth kinetics. The developed software tool was tested for its ability to simulate densification saturation points, providing a basis for digital twin integration in ceramic manufacturing. The methodology bridges the gap between theoretical material science and practical industrial applications.

The results demonstrate that the Random Forest model significantly outperforms deterministic approaches, reducing prediction error by 25 times ($MAE=1.65$ μm) with an R^2 of 0.91. Feature Importance analysis revealed that sintering time (weight 0.485) exerts a more substantial influence on final microstructure than temperature (0.475) or MgO additives (0.040) for the studied dataset. This kinetic dominance suggests that peak sintering temperatures can be replaced by extended isothermal holding, potentially lowering energy consumption by 10–15%. The proposed ML-based approach provides a robust foundation for the development of digital twins, ensuring precise microstructural control while minimizing R&D costs.

Industry 4.0, sintering, diffusion kinetics, machine learning, model

Одержано (Received) 30.03.2026

Прорецензовано (Reviewed) 03.04.2026

Прийнято до друку (Approved) 07.04.2026