

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Кафедра наноелектроніки та модифікацій поверхні

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА МАГІСТРА  
зі спеціальності 153 -«Мікро- та наносистемна техніка»

на тему:

«Аналіз критеріїв формування високоентропійних сплавів на основі тугоплавких металів»

Владзієвська Поліна Антонівна

Завідувач кафедрою

\_\_\_\_\_ проф. О. Д. Погребняк

Науковий керівник

\_\_\_\_\_ ст. викл. В. М. Рогоз

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2020 р

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2020 р

Суми 2020

## ЗМІСТ

РЕФЕРАТ .....	4
ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ ТА ТЕРМІНІВ .....	5
ВСТУП.....	6
РОЗДІЛ 1. ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ВИСОКОЕНТРОПІЙНИХ СПЛАВІВ .....	7
1.1 Концепції сплавів і основні ефекти високоентропійних сплавів .....	8
1.2 Класифікація високоентропійних сплавів .....	13
1.3. Металеві покриття ВЕС .....	15
1.4. Керамічні покриття на основі високоентропійних сплавів.....	17
1.5 Нанокристалічні високоентропійні сплави.....	18
1.7. Композиційні покриття на основі високоентропійних сплавів .....	21
1.8 Високотемпературні характеристики.....	22
РОЗДІЛ 2. МАШИННЕ НАВЧАННЯ В МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ .....	25
2.1 Вибір даних.....	29
2.2 Особливість інженерії.....	30
2.3 Моделювання аналізу матеріалів .....	30
2.4 Наївний класифікатор Байєса .....	31
2.5 Дерево рішень.....	32
2.6 Використання машинного навчання .....	33
2.7 Аналіз властивостей матеріалів.....	34
2.7.1 Виявлення деградації .....	34
2.7.2 Аналіз наноматеріалів.....	35
2.7.3 Прогнозування молекулярних властивостей .....	36
2.8 Градієнтний бустинг .....	38
2.8.1 Контроль розміру дерева .....	40
2.9 Параметри алгоритму машинного навчання .....	42
РОЗДІЛ 4. ТЕХНІКА БЕЗПЕКИ ПРИ РОБОТІ З ПЕРСОНАЛЬНИМ КОМП'ЮТЕРОМ І ОХОРОНА ПРАЦІ НА ПІДПРИЄМТСВІ.....	55
4.1. Загальні положення.....	55
4.2. Вимоги безпеки перед початком роботи.....	58
4.3. Вимоги безпеки під час виконання роботи.....	59

4.4 Вимоги безпеки після закінчення роботи .....	62
4.5 Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях .....	63
4.6 Охорона праці на підприємстві .....	63
ВИСНОВКИ .....	69
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ .....	70

## РЕФЕРАТ

Випускна кваліфікаційна робота містить 73 сторінки тексту, 16 рисунків і 4 розділи тексту.

Графічна частина роботи містить порівняння критеріїв високоентропійності сплавів.

У першому розділі проведений огляд літературних джерел по критеріям високоентропійності сплавів.

У другому розділі проведений огляд використання машинного навчання в матеріалознавстві.

Третій розділ містить аналіз високоентропійних сплавів.

Четвертий розділ містить техніку безпеки при використанні персонального комп'ютера, а також охорону праці на підприємстві.

Приведені 36 літературних джерела.

За результатами роботи зроблені висновки.

Ключові слова:

- високоентропійні сплави
- машинне навчання
- аналіз сплавів

## ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ ТА ТЕРМІНІВ

**ОЦК** - об'ємноцентрована кубічна ґратка;

**ГЦК** - гранецентрована кубічна ґратка;

**ГЩУ** - гексагональна щільноупакована комірka або ґратка;

**ОФ - структура** - однофазна структура;

**ІМ - фаза** – інтерметалічна фаза;

**ВЕС** - високоентропійні сплави;

**МСЕ** - метод скінченних елементів;

**СЕМ** - скануючий електронний мікроскоп;

**ГМІ** - гігантський ефект магніто-імпедансу;

**ДР** - дерево рішень;

**ІА** - ітеративний алгоритм;

**ШНМ** - штучна нейронна мережа;

**ЗП- ШНМ** - штучна нейронна мережа для зворотнього поширення;

**ФРБ- ШНМ** - функція радіального базису штучної нейронної мережі;

**КТ** - квантова точка;

**ДРГБ** - дерева регресії градієнтного бустингу;

**ВЕС-МС** - високоентропійні сплави-металеві стекла;

**АІМД** - Ab initio молекулярна динаміка;

**КВЕ** - концентрація валентних електронів;

**ТФЩ** – теорія функціоналу щільності

## ВСТУП

Досить широкого розповсюдження отримало дослідження і практичне використання сплавів з високою ентропією. Перша згадка стосовно високентропійних сплавів датується 2004 роком. На даний момент очікується, що багатокомпонентні сплави з високою ентропією будуть одними із нових конструктивних матеріалів. Високентропійними сплавами є сплави, які мають принаймні п'ять основних елементів концентрація кожного з яких становить від 5 до 35 ат.%. Особливості їх структури дозволяють застосовувати їх в різноманітних галузях.

Деякі високентропійні сплави мають складну мікроструктуру, яка включає в себе велику кількість інтерметалічних сполук. Саме цей фактор ускладнює дослідження сплавів через їх крихкість. Інші сплави навпаки мають просту ОЦК або ГЦК фазу твердого розчину. Існує різноматнітна кількість параметрів, що визначає «високентропійність» сплавів. Кожен компонент елементу сплаву може бути визначений, як розчинений атом. Разом з тим спостерігається серйозне спотворення решітки, викликане великою різницею атомних радіусів між такою кількістю компонентів, що спричиняє відмінність між високентропійними сплавами і звичайними сплавами.

Основним завданням роботи було створення алгоритму машинного навчання для аналізу критеріїв високентропійності сплавів та виявлення особливостей елементного складу для отримання однофазного сплаву.

Мета роботи полягала у аналізі впливу критеріїв високентропійності сплавів на формування їх фазового складу.

## РОЗДІЛ 1. ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ВИСОКОЕНТРОПІЙНИХ СПЛАВІВ

Параметр  $\delta$ , прийнятий для опису всебічного ефекту різниці атомних розмірів у багатокомпонентних сплавах

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^N c_i (1 - r_i / \bar{r})^2} \quad (1.1)$$

де  $\bar{r} (= \sum_{i=1}^n c_i r_i)$  – атомний радіус. Тут  $N$  - кількість компонентів у системі сплаву,  $c_i$  - атомний відсоток  $i$ -го компонента[1].

Інший параметр, тобто ентальпія змішування, використовується для характеристики хімічної сумісності багатьох основних компонентів

$$\Delta H_{mix} = \sum_{i=1, i \neq j}^n \Omega_{ij} c_i c_j \quad (1.2)$$

де  $\Omega_{ij} (= 4\Delta H_{AB}^{mix})$  - регулярний параметр взаємодії розплаву між  $i$ -м та  $j$ -м елементами і  $\Delta H_{AB}^{mix}$  - ентальпія змішування бінарних рідких сплавів.

Сплави з високою ентропією з  $n$  елементами характеризуються великою ентропією змішування

$$\Delta S_{max} = -R \sum_{i=1}^n c_i \ln c_i \quad (1.3)$$

хоча цей вираз не враховує міжатомну взаємодію, властиву справжнім сплавам. Дослідження показали, що сплави з високою ентропією не є хаотичними твердими розчинами, кристалізованими в стані з двома або більше фазами і можуть розкладатися як на дендрити, так і на інтердендрити. Тому дослідження [2] ставить під сумнів ідею застосування показника високоентропійності до багатокомпонентних сплавів.

Сплави з високою ентропією привернули велику увагу завдяки тому, що вони мають унікальні властивості. ОЦК фаза значно підвищує твердість сформованих високоентропійних сплавів. Можна виділити такі основні механічні властивості, як

деформаційна зміцнювальна здатність, абразивний знос і залишковий електричний опір сплавів з високою ентропією.

При цьому висока ентропія змішування елементів дозволяє отримувати сплави, що містять тверді розчини з простими кристалічними структурами.

Наявність атомів з різними радіусами, електронною будовою і властивостями в твердому тілі заміщення розчинів призводить до значного спотворення решітки. Ці фактори сприяють зміцненню твердого розчину, при цьому зменшуючи активність дифузії і підвищуючи термостійкість сплавів. Варто зазначити, що міцність, термостійкість, корозійна стійкість і зносостійкість високоентропійних сплавів при кімнатній і більш високих температурах також підвищуються [3].

Згідно співвідношенню Холла-Петча, підвищення твердості високоентропійних сплавів за рахунок подрібнення зерен було доведено у багатьох дослідженнях в основному за рахунок холодної деформації і рекристалізації [4].

Існує багато методів очищення зерен для традиційних сплавів твердих розчинів. Одним з методів, який досить часто використовується є метод ефекту розчиненої речовини, який пов'язаний з переохолодженням за умови затвердіння розчину. Для композиційно простих сплавів, наприклад, розбавлених бінарних сплавів твердих розчинів, розчинена речовина відхиляється вбік перед границею поділу «тверде тіло - рідина» під час затвердіння розчину.

### **1.1 Концепції сплавів і основні ефекти високоентропійних сплавів**

Перша основоположна концепція - це дослідження незвіданих центральних областей фазового простору багатокомпонентного сплаву. Ця ідея фокусується на величезному просторі, який знаходиться в різноматніх областях багатокомпонентних фазових діаграм. Ця ідея не накладає обмежень на кількість або концентрацію елементів у сплавах або на кількість або типи фаз в мікроструктурах.



Друга основна концепція - віддавати перевагу однофазним мікроструктурам над інтерметалічними з'єднаннями, при цьому контролюючи конфігураційну ентропію в складних сплавах.

Альтернативне визначення високоентропійних сплавів полягає в тому, що це може бути будь-який сплав з ідеальною конфігураційною ентропією  $\geq 1,5R$ , де  $R$  – газова стала.

Оскільки загальною мотивацією є надання переваги ОФ мікроструктурам із використанням «простих» ОЦК, ГЦК, ГЦК кристалічних структур, часто вважають високоентропійні сплави обмеженими ОФ мікроструктурами, хоча жодне визначення не встановлює ці вимоги.

Ця концепція формалізована для першого з чотирьох основних ефектів, які були запропоновані описати очікувану поведінку ВЕС. Ці основні ефекти представляють гіпотези, які тепер можна оцінити, використовуючи безліч опублікованих даних.

Чотири основні ефекти високоентропійних сплавів - це висока конфігураційна ентропія, інертна дифузія, спотворення решітки і ефект коктейлю.

Гіпотеза високої ентропії, як правило, розглядає лише конфігураційну ентропію та використовує рівняння Больцмана

$$S = k \ln N \quad (1.4)$$

для моделювання конфігураційної ентропії  $S$  ідеального розчину з  $N$  елементів, кожен при еквімолярній концентрації, де  $k$  - постійна Больцмана

Одним із підходів до оцінки цієї гіпотези є розгляд фракцій повідомлених мікроструктур високоентропійних сплавів, що містять лише ОФ, тільки ІМ або обидві фази ОФ + ІМ. Цей підхід неявно передбачає, що вивчені сплави і мікроструктури, що утворюються являють собою випадкову вибірку всіх систем високоентропійних сплавів.

В якості «фундаменту» високоентропійних сплавів було запропоновано ефект інертної дифузії ще в 2006 р [24], але перше дифузійне дослідження було опубліковано лише 2013 р [25]. Спостереження, що надихнули на гіпотезу інертної

дифузії [23] - наявність нанокристалів у литому матеріалі, підвищення температури перекристалізації та утворення нанокристалів або аморфних матеріалів у тонких плівках, нанесених розпиленням.

При оцінці даних, опублікованих до 2015 року, дослідники дійшли до висновку, що інертна дифузійна гіпотеза не була підтриманою. Проте, стають доступними додаткові дані, які були уточнені і розширені в роботах Цая та ін [23].

Беке та Ерделі [26] повторно аналізували попередні дані, використовуючи модифіковану форму рівняння дифузії, де температура, доекспоненційний член ( $D_0$ ) та ентальпія активації нормалізується за допомогою середнього арифметичного температур ліквідусу та солідусу. Цей новий аналіз підтверджує результати Цая та ін.

Перехресна дифузія - це явище, при якому градієнт концентрації одного елемента індукує або змінює потік частинок іншого елемента. Це відбувається, коли наявність одного елемента змінює хімічний потенціал інших елементів у сплаві. Цай та ін. припускали, що перехресні умови не мають значного впливу на полегшення аналізу сплавів. Кулкарні та Чаухан [23] оцінили взаємодифузію для дослідження в  $\text{CoCrFeNi}$ .

Аналіз Даянанда-Сона [23] використовується для вилучення коефіцієнтів міждифузії. Авторами у дослідженні виявлено, що  $\text{CoCrFeNi}$  має такий самий порядок величини як квазібінарні коефіцієнти інтердифузії, які досліджували Цай та ін. у системі сплавів у  $\text{CoCrFeMn}_{0,5}\text{Ni}$ .

Тим не менш, Кулкарні та Чаухан [23] чітко демонструють що міждифузійні перехресні умови можуть бути важливими і ними не можна нехтувати.

Гіпотеза спотворення решітки стверджує, що різні розміри основних елементів спричиняють «напругу» і викличуть важливі наслідки, які включають зменшення інтенсивності дифракції рентгенівських променів, збільшення твердості, зменшення електро- і теплопровідності і зменшення температурної залежності цих властивостей.

В крайньому випадку пропонується, щоб кристалічна решітка була зруйнована до аморфної. З трьох основних ефектів високоентропійних сплавів

ефект спотворення решітки отримав найменшу кількість досліджень на сьогоднішній день.

Це може спричинити труднощі у визначенні локальної деформації решітки, оскільки високоентропійні сплави не мають чітко визначеної референтної решітки, необхідної для визначення цих локальних штамів.

Також дуже складно виміряти локальну деформаційну решітку або вірніше, локальні атомні переміщення з вузлів решітки.

Гіпотеза спотворення решітки стверджує, що різні розміри основних елементів деформації спричиняють на атомному рівні важливі наслідки, які включають зменшення інтенсивності дифракції рентгенівських променів, збільшення твердості, зменшення електричної та теплопровідності та зменшення залежності цих властивостей від температури.

Ідея «мультиметалічних коктейлів» була опублікована до виходу першої статті стосовно високоентропійних сплавів і її використовували для описання трьох різних матеріалів: об'ємне металеве скло, метали "камедь" і високоентропійні сплави.

Спочатку це визначалось, як «приємна суміш», а потім стало означати синергетичну суміш, в якій кінцевий результат непередбачуваний і перевищує суму частин елементів.

Ця синергія і непередбачуваність достатньо зацікавила багатьох вчених. На додаток до металу камедь і високоентропійних сплавів відносять матеріали з близьконульовим коефієнтом теплового розширення, квазікристалами, фотоелектричними матеріалами і термоелектричними з'єднаннями.

Ефект коктейлю - це не перевірена гіпотеза, але тим не менш має глибокий вплив на галузь дослідження високоентропійних сплавів.

Однофазні ОЦК, структуровані ОЦК розглядаються, як перспективні високотемпературні матеріали завдяки їх високій стійкості до розм'якшення при високих температурах та інертному дифузійному явищу. Однофазні ГЦК, структуровані ГЦК, такі як еквіатомні сплави  $\text{CoCrFeMnNi}$  показали високу

міцність, що приписують твердий розчин і гарну пластичність при великій кількості систем ковзання ГЦК при кімнатній температурі.

Зовсім недавно двофазні високоентропійні сплави стали привертати увагу завдяки їх хорошій механічній реакції, що походить від розподілу напружень і деформацій між пластичним ГЦК фаза і жорсткою ОЦК фазою.

Як вже згадувалося вище, багато дослідників зосередилися на цьому ефекті легуючої фази, механічних властивостях та поведінці деформації в різних високоентропійних сплавах.

Серед них сплав  $\text{CoCrFeMnNi}$  є одним з найбільш широко досліджуваних високоентропійних сплавів, але поки що ніякої уваги не було присвячено дослідженню формування сплаву.

Успішний розвиток високоентропійних сплавів та промислового застосування нового матеріалу критично залежить від сформованості аркуша металу. Глибоке нанесення, яке викликає напругу, згинання та стиснення є одним із широко використовуваних процеси формування металу. Тому авторами у дослідженні розглянута глибока поведінка утворення високоентропійного сплаву  $\text{CoCrFeMnNi}$  та його граничний коефіцієнт витягування досліджуються за допомогою глибокого випробування витяжки.

Механічні властивості та досліджені характеристики мікроструктури надають базове розуміння глибокої витяжності та деформаційної поведінки. Крім того, процес глибокого нанесення моделюється методом скінченних елементів (МСЕ) для аналізу напружень, розподілу деформацій, та анізотропну поведінку [25].

У той же час теоретичні знання стає також більше важко отримати. У цьому сенсі високоентропійні сплави представляють особливість випробування, перевірку обмежень будь-якого сучасного підходу до дизайну сплавів. Що стосується високоентропійних сплавів, то вихідна точка вже значно відрізняється від більш типової двійкової суміші: у багатовимірній фазовій діаграмі, відомо лише те, що знаходиться поблизу її центру - тобто еквіатомний склад, система має високу ймовірність утворення переважно однофазного неупорядкованого сплаву завдяки

максимально високій конфігураційній ентропії, хоча ця особливість цього не робить, сам по собі гарантує такий результат .

Як показують останні дослідження, кілька інших факторів також впливають на отриману фазову структуру. Поза цим пунктом, будь-яка зміна концентрації кожного елемента або додавання/видалення інших для того, щоб змінити властивості, стає набагато більше складне завдання, оскільки інформації практично немає, починаючи з того простого факту, що невідомий діапазон концентрацій для якого існує вихідна однофазна структура і чи може заміна лише одного елемента призвести до іншої фазової структури.

Ще є одна додаткова функція, яка поширена у високоентропійних сплавах. Хоча це правда, що багато досліджених композицій, як правило, демонструють домінуючу ознаку суцільний твердий розчин, також вірним є те, що утворення невеликих інтерметалідних осадів відбувається майже завжди, навіть якщо їх наявність не виключає сплав від наявності сильних характеристик високоентропійних сплавів.

Також можливо, що поєднання такої кількості елементів може призвести до тонких змін у очевидно однорідної матриці твердого розчину - тобто незначні відмінності в концентрації всіх елементів у сплаві, не змінюючи занадто багато його природно однорідний розподіл різних атомних видів.

## **1.2 Класифікація високоентропійних сплавів**

Високоентропійні сплави мають ряд переваг в значенні питомої міцності - межі текучості над щільністю матеріалів порівняно з звичайними конструкційними матеріалами[14]. Крім того зазначено про те, що високоентропійні сплави володіють зміцненням та антиоксидацією при підвищених температурах, які ще більше розширили їх технічне застосування, Тому високоентропійні сплави мають стати перспективними кандидатами, які будуть задовільняти критичні вимоги складного, екстремального та високочутливого середовища, особливо в атомній, турбінній та аерокосмічній промисловості.

Покриття поверхні є ефективною стратегією покращення довговічності конструкційних компонентів, завдяки модифікації/посиленню механічних та функціональних властивостей. Окремо із сипучих конструкційних матеріалів та матеріалів на основі високоентропійних сплавів також застосовуються як привабливі покривні матеріали завдяки чудовим властивостям згаданим вище.

Покриття на основі високоентропійних сплавів, нанесені на поверхні підкладки у вигляді товстих шарів або тонких плівок можуть покращити характеристики поверхні за передумов належного складу та осадження параметрів. Отже, було опубліковано ряд досліджень покриттів на основі високоентропійних сплавів.

Розробка високоентропійних сплавів та пов'язаних з ними покриттів має великий потенціал для вирішення нагальних потреб високоефективних матеріалів для покриття поверхонь, що служать в екстремальних умовах навколишнього середовища. Виходячи з цього, більш детально розглянута інформація стосовно високоентропійності сплавів, включаючи концепції, класифікації, процеси виготовлення, мікроструктури, властивості та пов'язані з ними додатки.

Досліджені матеріали, що стосуються високоентропійності сплавів, зазнали досить широкого розповсюдження завдяки своїм унікальним властивостям та потенціалу застосування в промислових умовах. Тим часом остаточні характеристики поверхні регулюються елементом фаз, мікроструктури покриття тощо.

На основі цього вже склалася класифікація системи найсучасніших високоентропійних сплавів та пов'язаних з ними покриттів.

Покриття на основі високоентропійних сплавів поділяються на :

**за типом хімічного зв'язку :**

- металеві покриття ВЕС
- керамічні покриття ВЕС

**- за структурою:**

- аморфні
- нанокристалічні

- композиційні

Композитні покриття на основі високоентропійних сплавів, в яких високоентропійні сплави можуть діяти як матриця, сполучна для твердої кераміки та арматури з легких сплавів, таких як сплав Al та Mg.

### 1.3. Металеві покриття ВЕС

Високоентропійні покриття з перехідного металу зазвичай містять наступні елементи, наприклад, Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni, Ti та V. Високоентропійні системи, що містять елементи "Co – Cr – Fe – Ni", перетворилася на широкі системи високоентропійних сплавів наприклад, сплави серії "Кантор" - "CrMnFeCoNi". Інакше, вогнетривкі високоентропійні покриття головним чином складаються з наступних елементів з набагато вищими температурами плавлення : Cr, Hf, Mo, Nb, Ta, Ti, V, W та Zr, а також тугоплавкими елементами, такими, як Al і Si з покращеними властивостями та зменшенням щільності .

Вогнетривкі високоентропійні покриття, призначені для запобігання субстратності матеріалів від високотемпературного окислення, стирання та корозії. На основі легуючої конструкції та бажаних властивостей є вогнетривкі високоентропійні покривні матеріали, які в основному класифікуються на MoNbTaW, HfNbTaZr, CrMoNbTa та серії CrNbVZr.

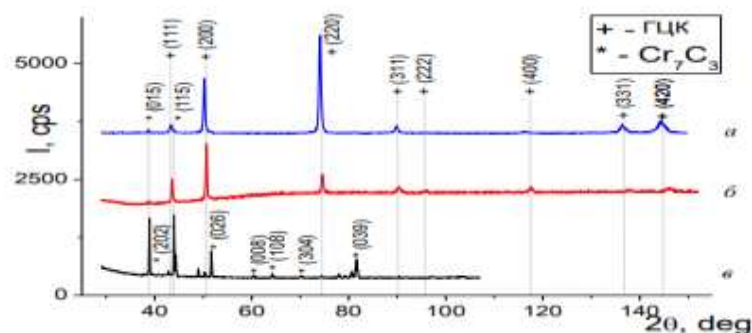


Рисунок 1.1 — Дифрактограми сплавів в литому стані: а - CrFe<sub>2</sub>NiMnV<sub>0,25</sub>Co<sub>0,175</sub>; б – CoCrFeNiMnV<sub>0,25</sub>Co<sub>0,175</sub>; в – карбідної фази, виділеної зі сплаву

Проведено багато досліджень вогнетривких високоентропійних сплавів. У багатьох випадках дослідники отримували надзвичайно високу міцність при

кімнатній температурі. Однак гранична міцність на розрив або міцність на руйнування, як правило, знижується при підвищеній температурі через погану стійкість до окислення в середовищах з високою температурою[16].

Сплави на основі вогнетривких матеріалів без додавання Cr, Al та Si мають дуже погану стійкість до високих температур та проявляють при цьому катастрофічне окислення.

До цього часу було проведено досить небагато досліджень механізмів окисної поведінки для тугоплавких високоентропійних сплавів. Окислювальна поведінка і мікроструктура окисного шару тугоплавкого сплаву  $Al_xTiZrNbHfTa$ , де значення  $x$  можуть сягати від 0 до 1 була описана у дослідженні вчених.

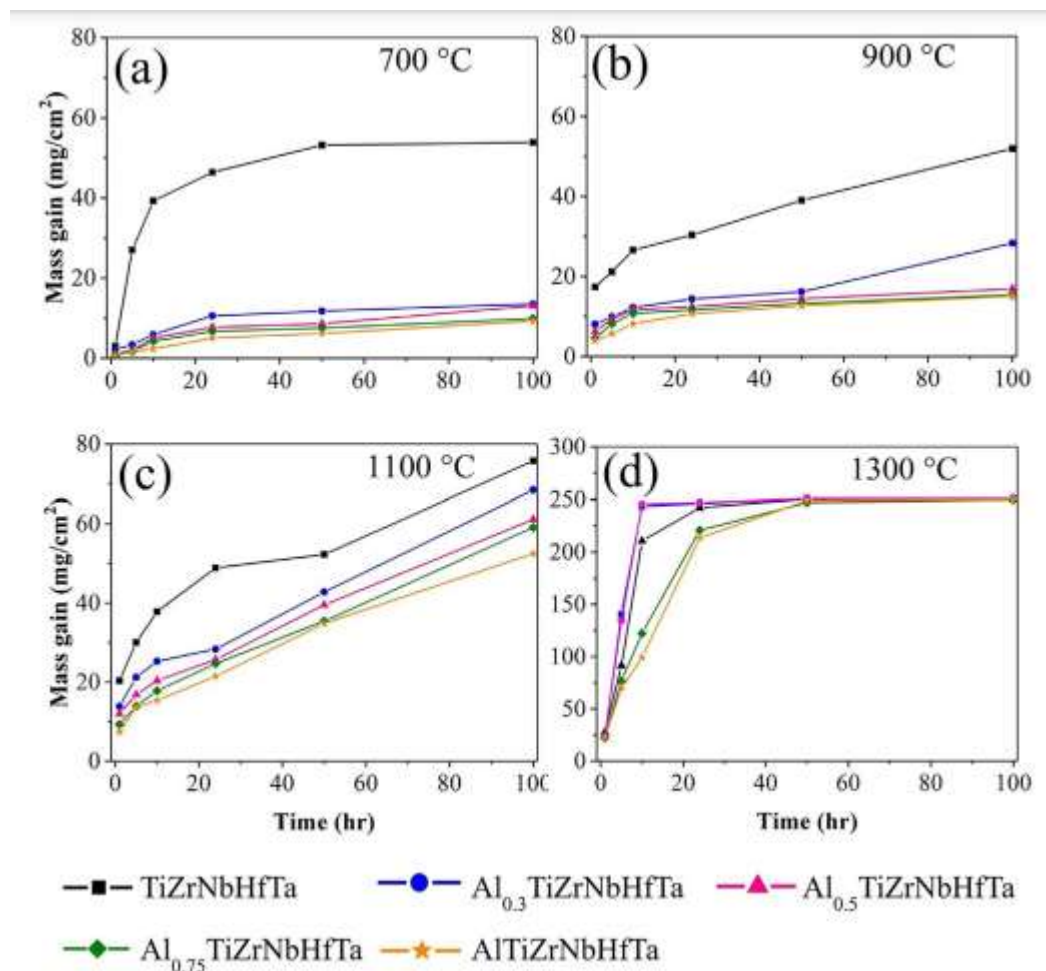


Рисунок 1.2 — Порівняння приросту маси внаслідок окислення різних високоентропійних сплавів  $Al_xTiZrNbHfTa$  при різних температурах: а) 700 С, б) 900 С, в) 1100 С і д) 1300 С.



Авторами було проведено експерименти з окисленням між значеннями температур 700 і 1300 °С. Сплави характеризували собою шаруваті оксиди, які були досліджені за допомогою СЕМ та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії. Поряд з даними експерименту з окисленням, що характеризується окислювальним шаром мікроструктури також використовувались дані для визначення механізмів окислення сплавів  $Al_xTiZrNbHfTa$  при значеннях температур 700 і 1300 С.

Можна зазначити, що швидкість дифузії і стійкість до термічного пом'якшення металевих матеріалів безпосередньо пов'язані з температурами плавлення матеріалу. Досить важливим аспектом є те, що вогнетривкі високоентропійні сплави повинні мати гарне поєднання підвищених температурних механічних властивостей. Досліджено, що висока питома міцність NbMoTaW та VNbMoTaW високоентропійних сплавів може підтримуватися до 1800 К, які навіть кращі за деякі суперсплави, такі як Inconel<sub>718</sub> та Haynes

Унікальність мікроструктури роблять вогнетривкі високоентропійні сплави досить міцними і стійкими до термічного пом'якшення, однак для того, щоб застосовувати вогнетривкі високоентропійні сплави для машинобудування необхідно проводити додаткові дослідження для усунення труднощів в експлуатації.

Можливо виокремити такі характеристики:

По-перше, вогнетривкі високоентропійні сплави зазвичай містять важчі елементи ,отже, демонструють високу щільність.

По-друге, механічні властивості вогнетривких матеріалів високоентропійних сплавів при кімнатній температурі, безумовно, дуже важливі. Результати досліджень говорять, що високоентропійні сплави чудові при високій температурі ,при цьому дуже гарні показники механічних властивостей та деформаційної поведінки при кімнатній температурі дуже рідкісні[17].

#### **1.4. Керамічні покриття на основі високоентропійних сплавів**

Складовими елементами у високоентропійних сплавах переважно є перехідні метали, які служать для утворення бінарного перехідного металу нітридів та карбідів. Грунтуючись на концепції проектування високоентропійних сплавів, різні нітридні, карбідні, оксидні та карбонітридні високоентропійні матеріали можуть наноситися на підкладку, застосовуючи техніку нанесення реактивного покриття, таку як реактивне магнетронне розпилення, при якому атоми або іони подані від мішеней реагують з  $N_2$ -вмістом,  $CH_4$ -вмістом,  $O_2$ -вмістом та  $CH_4$  потоком, що містить  $N_2$ .

Можна зауважити, що додані елементи N, C та O у високоентропійні покриття є сумішшю бінарних нітридів/карбідів/оксидів. Ці елементи, що входять до складу перебувають у стані твердого розчину з ефектом високої ентропії.

В основному компоненти складаються з міцних нітридів/карбідів/оксидів елементів, які утворюються таких, як Al, Ti, Cr, Si, Nb, Zr та ін. Повідомляється, що ці керамічні покриття високоентропійних сплавів мають гарні властивості поверхні, такі як висока твердість, термічна стійкість, корозійна стійкість і низька дифузійність. Ці показники мають великий потенціал у твердих захисних покриттях і дифузійних бар'єрах.

Дослідження демонструють, керамічні покриття, які базуються на основі високоентропійних сплавів з відповідними складами та обробкою параметрів перевершують традиційний бінарний нітрид, карбід, оксидне та карбонітридне покриття в основному завдяки комбінованому ефекту високої ентропії, спотворенню решітки та млявої дифузії.

## **1.5 Нанокристалічні високоентропійні сплави**

На даний момент отримання нанокристалічних високоентропійних сплавів є одним із провідних напрямків досліджень. Традиційно нанокристалічний порошок високоентропійних сплавів має бути приготований з використанням механічного легування елементарної суміші.

По-перше, необхідні окремі елементи порошків подаються в кульовий млин і розмелюються досить довго, поки не утворюються фази високоентропійних сплавів. Цей шлях відомий як механічне легування (МЛ).

Другий підхід пов'язаний з подрібненням злитка високоентропійних сплавів відливається кульовим фрезеруванням при надзвичайно низькому рівні температури[5].

Особливо можна виокремити те, що високоентропійні сплави служать високотемпературними конструкційними матеріалами і тому дуже важливо вивчити їх структурну стійкість і механічні властивості при підвищених температурах.

Однак, останні дослідження показали, що інтерметалідні фази або частинки вторинної фази також спостерігалися в деяких високоентропійних сплавах, особливо після відпалу або термомеханічної обробки. Варто відзначити, що не звертаючи увагу на шкідливі наслідки, які спричинаються інтерметалідними фазами, все ж таки невелика кількість інтерметалідних сполук /вторинних фаз мали сприятливий вплив на механічні властивості високоентропійних сплавів в багатьох випадках.[6]

## **1.6 Аморфні високоентропійні сплави**

Іноє запропонував три емпіричних правила, пов'язаних із загальними рисами металевих стекол з великою склоутворюючою здатністю[7]:

- 1) Система сплаву містить не менше трьох елементів.
- 2) Ентальпія змішування серед основних елементів має велике і негативне значення.
- 3) Різниця в розмірах атомів між основними складовими елементами перевищує 12%.

Перше правило відповідає стратегії проектування багатокomпонентних сплавів. Хоча ці емпіричні правила застосовні не для всіх систем сплавів, вони є важливими керівними принципами для проектування об'ємних металевих сплавів скла. Крім того, ряд зазначених критеріїв були встановлені для вимірювання

склоутворюючих характеристик об'ємних металевих стекел, наприклад, зниженої температури склування.

На додаток до згаданих емпіричних правил і критеріїв вище, ентропія змішування є необхідним фактором, який слід враховувати при утворенні аморфної фази.

Багатокомпонентні аморфні мікрволокна - це малогабаритні багатокомпонентні металеві стекла, які задовольняють вимогам застосування мікроприладів. Зазвичай їх отримують методом прядіння з розплаву. Деякі феромагнітні аморфні мікрволокна мають чудові магнітом'які властивості і мають привабливий потенціал щодо застосування в магнітних датчиках.

Хоча деякі феромагнітні ВЕС демонструють видатні магнітні властивості, більшість також мають кристалічну структуру, що призводить до магнітної анізотропії. Наприклад, коерцитивність нерівних атомних  $\text{FeCoNiAl}_{0.2}\text{Si}_{0.2}$  ВЕС в значній мірі залежать від орієнтації кристалів і розміру зерен сплаву. Ця примітивна магнітна анізотропія, викликана кристалічною структурою, може бути ефективно усунута в аморфних мікрволокна багатокомпонентних сплавів.

Гігантський ефект магніто-імпедансу в аморфному мікрволокні  $\text{Co}_{68.15}\text{Fe}_{4.35}\text{Si}_{12.5}\text{B}_{15}$  вперше був відкритий Морі, який виявив, що імпеданс мікрволокна може різко змінюватися під дією магнітного поля. Згодом ефект ГМІ також був виявлений в аморфних стрічках і багатошарових плівках. Походження ефекту ГМІ зазвичай пояснюється шкірним ефектом провідника при високій частоті. У феромагнітних аморфних мікрволокнах на рух доменної стінки впливає зовнішнє магнітне поле, а глибина шкіри залежить від окружної проникності, яка змінюється в міру руху кругової доменної стінки.

Ефект ГМІ мікрволокна може бути покращений шляхом контролю методу обробки, прикладеного напруження та термообробки серед інших підходів. Як приклад, співвідношення ГМІ ( $\Delta Z/Z$ ) для покритих склом та знятих зі скла  $\text{Co}_{69.5}\text{Fe}_{4.35}\text{Cr}_1\text{Si}_8\text{B}_{17}$  аморфних волокон з подібним діаметром. Крива співвідношення ГМІ перетворюється з одного піку на подвійний пік завдяки різним характеристикам поверхневої магнітної анізотропії волокон.

### 1.7. Композиційні покриття на основі високоентропійних сплавів

Композитні покриття, пов'язані з високоентропійними сплавами, з'являються і надалі розширюють застосування високоентропійних сплавів.

В цих покриттях високоентропійний сплав є формою матриці з твердими керамічними підсиленнями або синтезується у вигляді твердих підкріплень у легких вагових сплавах (наприклад, Al та Mg). Тверді керамічні підсилення, наприклад, TiN, NbC, TiC та TiB<sub>2</sub> з високою температурою плавлення і твердістю, відмінною зносостійкістю і хімічною стабільністю, а також добре синтезований металургійний зв'язок з матрицею високоентропійних сплавів в покриттях використовується для подальшого покращення поверхонь.

Дотепер були досягнуті певні успіхи у дослідженнях композитних покриттів на основі високоентропійних сплавів з видатними властивостями, такими як покриття TiN/CoCr<sub>2</sub>FeNiTi, NbC/AlCoCrFeNi виготовлені за допомогою лазерної абеляції та TiC – TiB<sub>2</sub>/CoCrCuFeNi покриття, синтезовані дугою, що переносить плазму лазерної абеляції.

Окрім твердих керамічних підсилень, жорсткі Ni<sub>60</sub> порошки також були прийняті в якості підсилення і входять до складу високоентропійного сплаву AlCoCrFeNiTi за допомогою плазмового напилення. За рахунок плазмового напилення твердість і зносостійкість при підвищеній температурі розпилувального покриття посилюється.

Виготовленні зміцненим високоентропійним сплавом частинки матриці Al/Mg композитні покривні матеріали можуть у повній мірі використати перспективні властивості ВЕС-частинок (наприклад, висока твердість, відмінна зносостійкість і видатна термостійкість, невелика вага матриці Al/Mg та гарна фізико-хімічна сумісність між ВЕС та матрицею.

Отже, частинки AlCoCrCuFeNi, які підсилювали Mg матричне композитне покриття, виготовляли ін'єкційним методом лазерного розплаву, в якому трибологічні властивості покращилися очевидно. Механічне легування було прийнято до синтезування композиційної системи покриття Al – CrMnFeCoMoW в

яких опір окиснення Ti підкладки при високій температурі був підвищений за рахунок утворення захисної оксидної плівки.

Таким чином, ВЕС металеве покриття, керамічне ВЕС покриття та композитні, амфорні і нанокристалічні покриття – це основні види покривних матеріалів на основі ВЕС в дослідженій літературі. Також передбачено, що такі класифікаційні системи будуть оновлені або змінені з постійним розвитком високоентропійних сплавів та методів модифікації поверхонь[18].

## 1.8 Високотемпературні характеристики

Кожен елемент у високоентропійних сплавах, як правило, займає позицію, яка мінімізує енергію його сплаву та енергія зв'язку. Ці параметри в свою чергу залежать від переважних локальних хімічних середовищ, міжатомної міждії та атомних обсягів видів з різними складами.

ВЕСи привернули значну увагу завдяки своїй чудовій радіаційній стійкості у порівнянні зі звичайними однофазними аустенітними нержавіючими сталями Fe-Cr-Ni, що робить їх потенційними кандидатами для високотемпературного розподілу та плавлення.

Стійкість при опроміненні після каскадних подій можна пояснити наявністю напружень високого атомного рівня, що виникають внаслідок різниці в атомних розмірах в ВЕС та їх тенденція до аморфізації та перекристалізації при високих швидкостях після опромінення індукований тепловий сплеск [7].

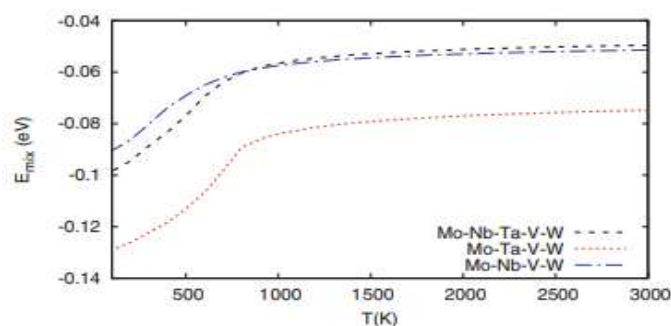


Рисунок 1.3 - Енタルпія змішування трьох екімолярних високоентропійних сплавів: квітарна Mo-Nb-Ta-V-W та четвертини Mo-Ta-V-W, Mo-Nb-V-W, як функція температури.

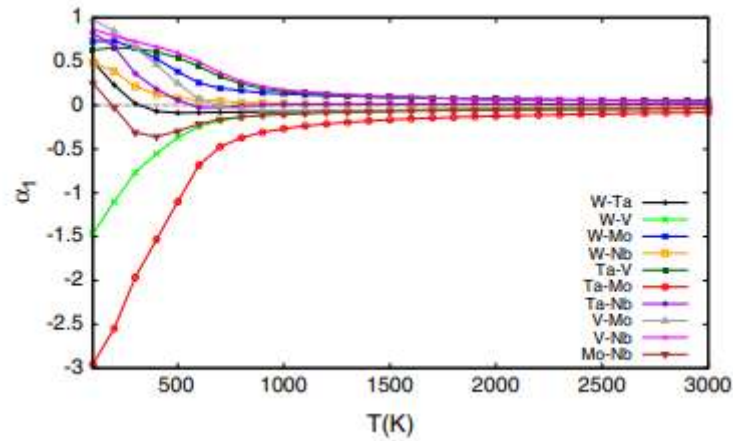


Рисунок 1.4 — Еволюція 1 найближчого сусіда параметрів ближнього порядку в еквімолярних ВЕС Мо-Nb-Ta-V-W як функція температури

Механічні властивості багатофазних мікроструктур сильно залежать від таких процедур обробки, як плазмове спікання, кручення високого тиску і відпалена холодна прокатка, які зазвичай використовуються для розробки високоефективних ВЕС.[8]

Висока ентропія змішування, вибір фази та стабільність фаз у ВЕС досить важливі через ускладнену взаємодію між багатьма елементами. Вплив доданків Ті на механічні властивості з цих ВЕС можна інтерпретувати як твердий розчин моделі загартовування. Було встановлено, що як  $\text{TiNbMoTaW}$ , так і ВЕС  $\text{TiVNbTaMoW}$  демонструють межу текучості вище 550 МПа при 1200 С. Високотемпературні механічні характеристики цих два ВЕС робить їх потенційними матеріалами для високо температурних додатків[9].

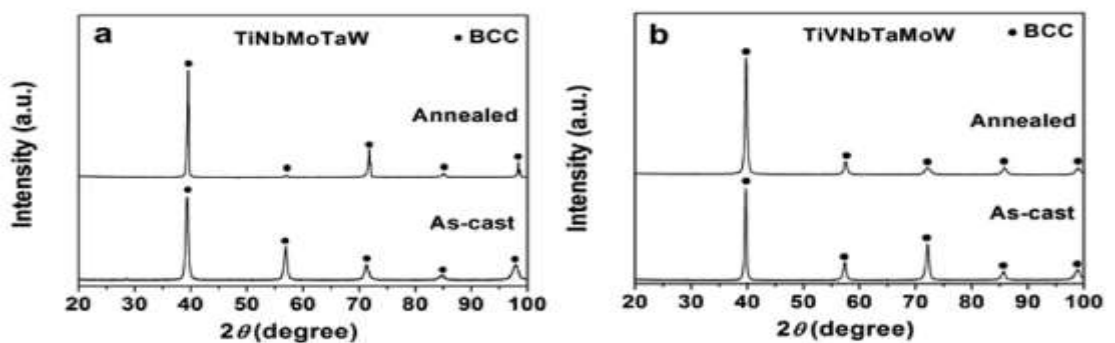


Рисунок 1.5 — Ділянки дифракційних спектрів високоентропійних сплавів (a)  $\text{TiNbMoTaW}$  та (b)  $\text{TiVNbTaMoW}$

Більше того, виготовлення високоентропійних сплавів не вимагає спеціальних технологій обробки або обладнання, що вказує на те, що масове виробництво високоентропійних сплавів можна легко впровадити з наявним обладнанням. Понад 30 елементів звикли використовувати у високоентропійних сплавах.

Останніми роками спостерігаються деякі нові досягнення в галузі досліджень традиційного мікромолочного процесу. Наприклад, деякі вчені вивчали ефект подрібнення параметрів формування стружки при високошвидкісному шліфуванні. Ефект розміру абразивного зносу важко ріжучих матеріалів - суперсплав Inconel<sub>718</sub> на основі Ni в процесі подрібнення досліджували Дай і Дінг.

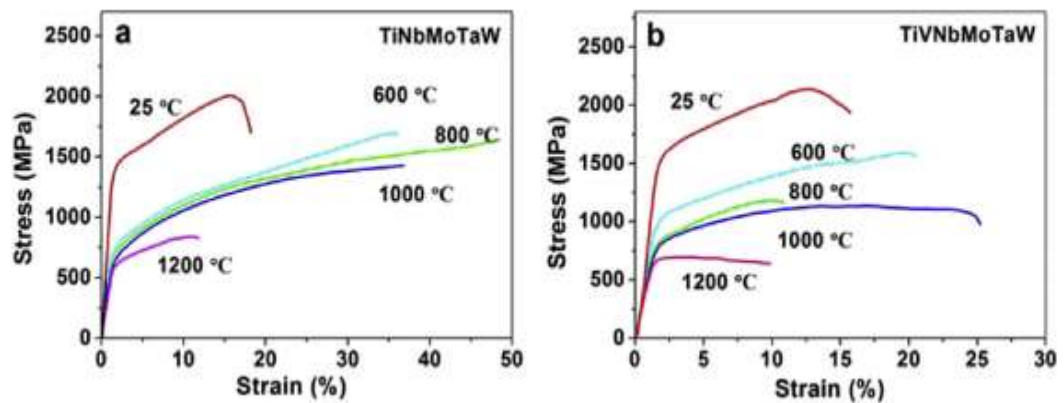


Рисунок 1.6 — Криві деформації стиснення напружень TiNbMoTaW (a) та TiVNbTaMoW (b) високоентропійних сплавів при кімнатній та підвищеній температурах.

Дінг та ін. також вивчали останні досягнення у шліфуванні залишкових напружень важко ріжучих металоконструкційних матеріалів - суперсплавів на основі Ni. Також було досліджено механізм формування та вплив залишкового напруження в деталях, був проведений аналіз технології виготовлення одношарового шліфувального круга в деталях.

Об'ємне металеве скло - новий вид аморфного металу, матеріал, який ще називають об'ємним аморфним сплавом. Об'ємний композитний матеріал з аморфного сплаву з високою міцністю, високою щільністю і гарною проникаючою здатністю досить широко використовується у військовій техніці[10].



## РОЗДІЛ 2. МАШИННЕ НАВЧАННЯ В МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

Поява нових матеріалів з гарними показниками та моделювання кількісних показників досліджень є досить актуальними в галузі матеріалознавства. Традиційні експерименти та моделювання обчислень досить часто довготривалі, що часто обмежує використання теоретичних основ. Таким чином постає питання про відкриття нових методів досліджень, які будуть надавати певні якісні результати за менший проміжок часу.

Останнім часом багато досліджень включають в себе машинне навчання, що відповідно сприяє значному покращенню результатів завдяки ефективному використанню часових ресурсів і точності прогнозування результатів.

На даний момент існують різні алгоритми машинного навчання. Більш детально нижче буде описано також наявні проблеми, пов'язані з машинним навчанням в матеріалознавстві, можливі рішення та прогнози потенційних напрямків майбутніх досліджень.

Так званий скринінг високоефективних матеріалів, моделювання кількісних співвідношень «структура- її активність» та інші питання, пов'язані з хімічною структурою матеріалів та їх різними біологічними ефектами є не тільки науково важливими, але й критичними для розвитку багатьох технічно відповідних галузей[31].

Важливо зазначити, що повторні експериментальні та теоретичні дослідження різноманітних характеристик матеріалів часто займають багато часу та є неефективними. Наприклад, інтервал часу для відкриття нових матеріалів є надзвичайно довгим, як правило, приблизно 10 -20 років від початку дослідження до першого успішного використання матеріалів.

Можливо виокремити такі основні сім етапів проведення нових досліджень, а саме відкриття, розробка, оптимізація властивостей, проектування та інтеграція системи, сертифікація, виготовлення та впровадження, а різні етапи можуть проводити різні інженерні або наукові групи в різних установах.

Хоча дослідженнями займаються досить компетентні групи вчених, однак можна відзначити майже відсутність зворотнього зв'язку між різними етапами досліджень.

Добре відомо, що експериментальне вимірювання та обчислювальне моделювання є звичайними методами, які досить широко застосовуються в галузі матеріалознавства. Однак важко використовувати ці два методи для пришвидшення виявлення матеріалів та їх вигляду через властиві обмеження як експериментальних умов, так і теоретичних основ. Взагалі кажучи, експериментальне вимірювання, яке зазвичай включає аналіз мікроструктури вимірювання властивостей, синтетичні експерименти є простим та інтуїтивно зрозумілим методом дослідження матеріалів, хоча він, як правило, проводиться не досить ефективно протягом тривалого періоду часу.

Крім того, такий підхід ставить високі вимоги щодо обладнання, експериментального середовища та досвіду дослідника. Крім того, обчислювальне моделювання, починаючи від розрахунків електронної структури на основі теорії функціоналу щільності, молекулярної динаміки, методів Монте-Карло та методу фазового поля і до континууму макроскопічних підходів - це ще один підхід, при якому існуюча теорія використовується для аналізу за допомогою комп'ютерних програм.

Порівняно з експериментальним вимірюванням, обчислювальне моделювання вимагає менше часу і є вигідним для проведення реальних експериментів, коли на кожному етапі є повний контроль над відповідними даними.

Тим не менш, можливо виділити декілька проблем, які пов'язані з обчислювальним моделюванням;

- це сильна залежність від мікроструктур матеріалів, які використовуються
- потреба у високопродуктивному обчислювальному обладнанні, як правило, у великих обчислювальних кластерах, на яких можуть працювати програми імітації обчислень

- не можна явно використовувати попередні результати розрахунків при вивченні нової системи.

Дослідження сучасних матеріалів часто вимагають тісної інтеграції між обчисленнями та експериментами, щоб отримати фундаментальне розуміння структур та властивостей матеріалів, що цікавлять, і те, як вони пов'язані з процедурами синтезу та обробки.

Зокрема, деякі експерименти можна проводити практично за допомогою потужних і точних обчислювальних інструментів, і, таким чином, відповідні інтервали часу можуть бути зменшені з 10 або 20 років, як це вимагається на основі традиційних методів до 18 місяців.

Складні вимоги, пов'язані з розумінням основних фізико-хімічних властивостей матеріалів та прискоренням їх технологічних застосувань - експериментальне вимірювання і обчислювальне моделювання часто не здатні вирішити виникаючі проблеми.

Машинне навчання є потужним інструментом для пошуку шаблонів у великих розмірах даних, воно використовує комп'ютерні алгоритми для емпіричних даних, моделюючи лінійні чи нелінійні взаємозв'язки між властивостями матеріалів та пов'язаними з ними факторами .

Останнім декілька років метод машинного навчання та метод великих даних успішно пройшли етапи усунення труднощів при моделюванні взаємозв'язків між властивостями матеріалів і складними фізичними факторами.

Як приклад, можна зазначити використання методу машинного навчання при пошуку матеріалів на основі невдалих експериментів та скринінг ефективних молекулярних органічних світлодіодів, що можливо розглянути як інноваційний режим розробки матеріалів, при якому машинне навчання відкриває нові гіпотези щодо умов формування успішного продукту

За останні 20 років обчислювальна діяльність пов'язана з матеріалознавством постійно переходила від розвитку техніки та суто обчислювальних досліджень матеріалів до відкриття та проектування нових матеріалів машинного навчання та знаходження даних .На даний момент обчислювальна діяльність існує завдяки

тісній співпраці між обчислювальними прогнозами та експериментальним підтвердженням.

Переваги сучасних стратегій дослідження матеріалів полягають у їх здатності знайти баланс між розумними експериментальними вимогами та низьким рівнем помилок, використання у повному обсязі великих наявних даних та пришвидшення процесу дослідження матеріалів.

Досить великі зусилля були спрямовані на розробку методів, які будуть більш актуальними. Ці методи поєднують традиційні експериментальні методи з інтелектуальними методами аналізу даних для вдосконалення експериментальної ефективності і зменшення рівня помилок.

Наприклад, Самптер та ін. запропонували новий інтегрований метод керування синтезом нових неорганічних речовин у матеріалах, що досягається за рахунок візуалізації та розсіюванні в поєднанні з масштабованими принципами.

Можна підсумувати так звану керівну ідеологію матеріалознавства у чотирьох парадигмах: перша парадигма - це емпіричне випробування штучного інтелекту. При цьому четверта парадигма може ідеально об'єднати три інші парадигми в аспектах теорії, експерименту та комп'ютерного моделювання.

Швидкий розвиток інформатики, енергетики, національної оборони та інших галузей наклали вирішальні і різноманітні вимоги до матеріалів. Однак традиційні методи виявлення нових матеріалів, такі як емпіричний метод проб і помилок і метод теорії щільності функціоналу, як правило, вимагає тривалих досліджень і циклів розробки, мають високу вартість поряд з низькою ефективністю і мають труднощі з розвитком матеріалознавства сьогодні.

Машинне навчання може істотно зменшити обчислювальні витрати та скоротити цикл розробки, а отже, це один з найефективніших способів заміни методу теорії щільності функціоналу для розрахунків або навіть повторюваних лабораторних експериментів.

Машинне навчання було запропоновано Самуелем в 1959 році і на даний момент широко застосовується в комп'ютерних галузях, економіці, дослідженні даних та біоінформатиці. При застосуванні машинного навчання дані відбираються

комплексно з урахуванням їх типу, якості та формату. Використання високоякісних даних може запобігти розгляду помилкової, відсутньої або надмірної інформації, а , отже, дослідники повинні збирати дані з авторитетних баз даних.

## 2.1 Вибір даних

У 2011 р. Сполучені Штати запропонували ініціативу щодо геному матеріалів, щоб підкреслити важливість масивних даних у розвитку матеріалознавства. Різні матеріальні бази даних, такі як «Open Quantum», база даних матеріалів, проект матеріалів, сховище обчислювальних матеріалів, Гарвардський проект чистої енергії, неорганічна база даних «Crystal Structure» та «AFLOWLIB» вже були використані для обчислювальних матеріалів. Крім того, використовується технологія обробки тексту відповідної літератури для збагачення існуючих баз даних[32].

Ракуглія та ін. запропонували використати метод машинного навчання на основі моделі даних відмов з невдалих експериментів на додаток обробки даних в матеріалознавстві. Вони інтегрували експериментальні дані, які були зібрані в результаті невдалих і менш успішних реакцій гідротермального синтезу для машинного навчання. Була створена так звана навчальна модель для прогнозування шаблону кристалізації кристалів селеніту ванадію. Ця модель перевершує традиційний ручний аналіз і точність аналізу даних може досягати 89% в прогнозуванні умов формування нового органічного шаблону

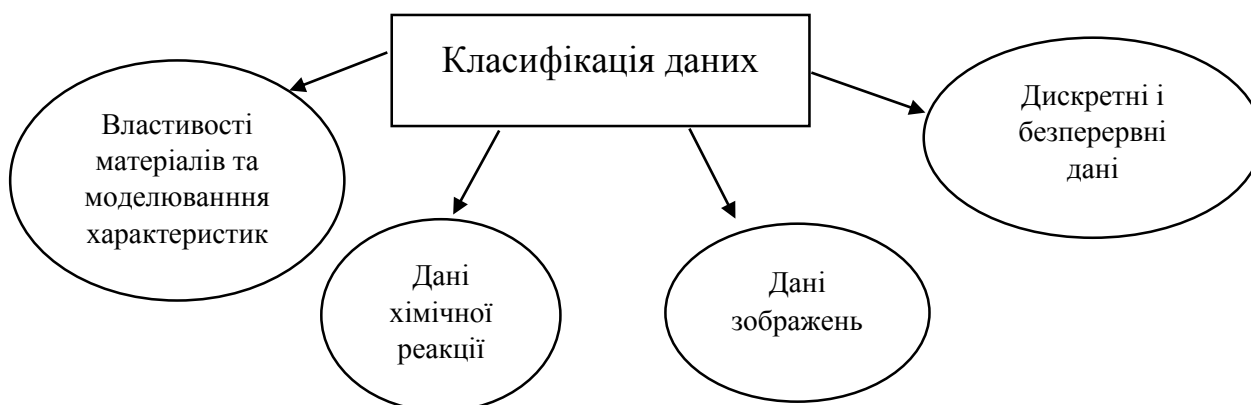


Рисунок 2.1 Класифікація даних для машинного навчання

## 2.2 Особливість інженерії

Після відбору даних слід вилучити відповідні характеристики для передбачуваної цілі, яка називається інженерною функцією.

Інжиніринг об'єктів - це процес вилучення об'єктів з необроблених даних, що дозволяє застосовувати алгоритми. Це має вирішальне значення відповідно до всієї моделі машинного навчання і визначає верхню межу її продуктивності.

Традиційні методи машинного навчання (поверхневе навчання) вимагали вибір функцій вручну. Наприклад, Олійник та ін. використовували методи машинного навчання для вивчення потенційних сполук Гайслера та їх властивостей. У цьому дослідженні вони опрацювали 22 ознаки (наприклад, номер групи елемента В, загальна кількість валентних електронів та різницю радіусів А/В) за допомогою експериментів для прискорення відкриття прихованих зв'язків шляхом застосування комп'ютерного забезпечення.

Лу та ін. відібрали 14 (наприклад, коефіцієнт допуску, загальний іонний заряд, р-орбітальні електрони і сума s- і р- радіусів орбіти) з 30 початкових ознак для тренування, а модель машинного навчання для прогнозування нерозкритих гібридних органічних перовскітів для фотоелектрики.

Однак ручне проектування функцій не є ідеальним варіантом. Обмеження людського досвіду впливає на труднощі вибору найбільш репрезентативних ознак для цілей прогнозування. Крім того, ручна інженерія характеристик вимагає більших трудових та обчислювальних витрат.

## 2.3 Моделювання аналізу матеріалів

Маючи достатньо даних у відповідному форматі, можна створити модель для аналізу матеріалів. Етапи моделювання включають вибір відповідних алгоритмів, вивчення даних і точне прогнозування.

Машинне навчання можна розділити на контрольоване навчання, навчання без нагляду, навчання під наглядом та навчання з підкріпленням. Навчання під

наглядом також відоме як «навчання з викладачем», а саме визначення відповідних результатів даних.

На відміну від них, відповідні результати навчальних даних без нагляду не є визначеними. Для навчання під надглядом, деякі з даних позначаються, а решта даних не мають маркування. Кількість непозначених даних часто значно перевищує кількість позначених даних. Натомість у навчанні з підкріпленням використовують вказівки для виконання правильних дій. Сигнали підкріплення, які подаються навколишнім середовищем використовуються для оцінки якості згенерованих дій та удосконалення стратегії адаптації до навколишнього середовища.

Доступні алгоритми реалізації чотирьох типів методів машинного навчання, описаних вище, можна розділити на два типи: поверхнєве навчання та глибоке навчання. Також існують декілька методів машинного навчання, нижче буде описано два основних метода - наївний класифікатор Байєса та дерево рішень.

## **2.4 Наївний класифікатор Байєса**

Наївний класифікатор Байєса, який широко застосовувався і вивчався з 1950-х років, являє собою серію простих класифікаторів ймовірностей які базуються на теоремі Байєса при сильній незалежності особливостей припущень.

Це не єдиний алгоритм для навчання таких класифікаторів, але має серію алгоритмів, які є заснованими на наступному принципі: кожна ознака вибірки є не пов'язаною з іншими.

Об'єкт, що підлягає класифікації, належить до категорії, яка відповідає максимальній імовірності. У багатьох практичних застосуваннях наївний параметр моделі Байєса використовує оцінку методу максимальної ймовірності.

Отже, наївну модель Байєса можна застосовувати і без використання ймовірності Байєса або будь-якої моделі Байєса. Однією з переваг наївного класифікатора Байєса є те, що він лише вимагає оцінки необхідних параметрів (середнього значення та дисперсії кожної змінної) на основі невеликої кількості даних навчання для прогнозування

Тому цей метод часто передбачає чи зможе стратегія, наприклад, синтетичного рецепту для нової молекули реалізувати бажаний результат.

## 2.5 Дерево рішень

ДР<sub>55</sub> - це метод апроксимації значень дискретних функцій. Це типовий метод класифікації, який індукує набір класифікаційних правил з набору тренінгу з метою правильної класифікації прикладів. Дерево рішень було вперше розроблено в 1960-х роках Дж. Россом Куінланом[32], який запропонував ітеративний алгоритм діхотомайзера (IA<sub>3</sub>). Потім алгоритм C4.5 був вдосконалений на базі IA<sub>3</sub> алгоритму з точки зору технології обрізки і правил виведення серед інших аспектів. Метод дерева рішень зазвичай складається з трьох етапів: вибору функції, генерації ДР і обрізки ДР.

Серед них метою відбору функцій є збереження даних, які володіють достатніми класифікаційними характеристиками; мета обрізки - зробити дерево більш простим і, таким чином, найбільш узагальнюючим. Може бути кілька ДР, які можуть правильно класифікувати дані, отже, дуже важливо вибрати ДР, які менш суперечать даним і є досить узагальнюючими.

Карет використовував ДР для синтезу нових сполук Гейслера АВ<sub>2</sub>С. Навчальні дані були отримані від бази кришталевих даних і бази даних діаграми фази сплаву з наступними умовами: (а) фази не містять водень, інертні гази, радіоактивні або актинідні елементи і (б) фази показують точну 1:2:1 стехіометрію, містять три компоненти і термодинамічно стабільні.

Для представлення сполук Гейслера було обрано двадцять дві ознаки (наприклад, групову кількість елемента В, загальну кількість р валентних електронів, різницю радіусів А/В та значення електронегативності кожного елемента).

Випадковий «лісовий» алгоритм, який складається з декількох дерев рішень був застосований для підготовки кількох предикторів та об'єднання їх результатів для отримання єдиного остаточного прогнозу. Кожен субпредиктор - це дерево рішень, який пройшов підготовку по невеликій підмножині навчальних даних.



## 2.6 Використання машинного навчання

У порівнянні з комп'ютерним моделюванням, машинне навчання може виявити закономірності у великих масивах з високою щільністю даних досить ефективно, швидко отримуючи корисну інформацію та виявляючи приховані закономірності. Тому він добре підходить для виявлення матеріалів і може прискорити процес прогнозування властивостей матеріалів, що зазвичай вимагає обчислювальних розрахунків і дорогих теоретичних розрахунків у галузі матеріалознавства.

Дослідження макроскопічних показників матеріалів головним чином зосереджується на взаємозв'язку структури та активності між макроскопічними наприклад, механічними та фізичними властивостями матеріалу та його мікроструктурою.

Через їх гарну ефективність у вирішенні проблем, пов'язаних з регресією та класифікацією, підходи до машинного навчання із залученням алгоритмів штучних нейронних мереж і підтримкою векторних машин в поєднанні з алгоритмами оптимізації широко застосовуються при вивченні макроскопічного прогнозування продуктивності.

У машинному навчанні ШНМ - це сімейство моделей, натхненних біологічними нейронними мережами такими, як центральна нервова система тварин, особливо мозок, які використовуються для оцінки або апроксимації функцій, які можуть залежати від великої кількості вхідних даних та є загалом невідомими. Підхід ШНМ - це, по суті, нелінійний метод статистичного аналізу з потужними можливостями для самонавчання та адаптації.

ШНМ для зворотного поширення (ЗП- ШНМ) -використовується для прогнозування поведінки матеріалів, таких як температурні реакції та розтягування, подовження, втрата, корозія та стискаючі властивості. Чжен та ін. використовував ЗП-ШНМ та модель лінійної регресії для прогнозування температур склування полімерів і виявили, що середня помилка прогнозування першого підходу (17К) була набагато меншою, ніж помилка другого (30 К).

Оскільки не потрібні попередні всебічні фізичні знання, ЗП - ШНМ може забезпечити значні переваги для використання, дозволяючи вирішувати такі проблеми з прийнятними помилками прогнозуванням та добрими можливостями узагальнення.

Однак вони мають повільний коефіцієнт конвергенції, а іноді можуть потрапляти до локальних мінімумів значень даних.

Крім того, ФРБ - ШНМ - це ще один тип ШНМ, який, поєднуючи концепцію ШНМ з радіальною базовою функцією, може принципово подолати проблему локальних мінімумів, а також має перевагу високої швидкості конвергенції.

Застосовуючи ФРБ - ШНМ для дослідження поширення тріщин у бітумно-шаруватій конструкції покриття, Гаєвський та Садовський [32] повідомили, що тріщини значно збільшуються із збільшенням товщини бітумного шару  $B_2$ . Більше того, моделювання ШНМ знайшло місце в інших додатках, таких як прогнозування температур плавлення, щільність та в'язкість сполук біопалива, енергії збудженого стану, бар'єрів дифузії та інших функціональних властивостей.

## **2.7 Аналіз властивостей матеріалів**

### **2.7.1 Виявлення деградації**

Машинне навчання більш точне і зручне, ніж людські судження при аналізі матеріалів для виявлення корозії металу і розтріскуванні асфальтового покриття та визначення міцності бетону. Агравал і ін. досліджували різні додатки, в яких методи машинного навчання такі ,як вибір функцій і прогностичне моделювання. використовуються для прогнозування втомної міцності стали шляхом вивчення взаємозв'язків між різними властивостями сплаву і його складом , технологічними параметрами.[33]

Вони зосередились на 25 особливостях, які пов'язані з втомою міцності і виявили, що температура відпуску була найважливішою особливістю, яка впливає на втомну силу.

Процес можна розділити на чотири етапи:

- По-перше, вихідні дані були попередньо оброблені з використанням знань домену.
- По-друге, для вибору об'єктів з високою релевантністю застосовувались класифіковані на основі ранжирування методи вибору об'єктів.
- Тоді для прогнозування втомної міцності використовувались алгоритми машинного навчання.
- Нарешті, залишена одноразова перехресна перевірка була використана для оцінки точності моделей. Результати показують, що багато методів машинного навчання, такі як штучна нейронна мережа, підтримка векторної машини та лінійна регресія реалізували високу точність прогнозування.

Модель, побудована Жибером і ін. запропонувала ефективну модель для перевірки залізничних шляхів. Модель була заснована на повністю конволюційній мережі.

Чотири конволюційних шари були використані для класифікації матеріалів і п'ять конволюційних шарів були використані для виявлення кріплення. Дослідники використовували штучно освітлений автомобіль для збору 203 287 зображень доріжок вздовж 85 миль шляху і анотованих даних, використовуючи налаштований програмний інструмент.

Набір даних був розділений на п'ять частин за допомогою 80% зображень, які використовувалися для навчання і 20% - для тестування. Для кожної сегментації даних 50 000 патчів кожного класу були обрані випадковим чином. Тому кожна модель була навчена 2 мільйонами патчів.

### **2.7.2 Аналіз наноматеріалів**

З розвитком штучного інтелекту, машинне навчання відіграє все більшу роль у галузі наноматеріалів. Ще в 1993 р. використання машинного навчання було запропоновано для вивчення розчинності  $C_{60}$ . Машинне навчання широко застосовується для прогнозування токсичності наноматеріалів, для виявлення нових нетоксичних наночастинок, для розробки взаємозв'язків наночастинок з різними структурами/властивостями, для вивчення квантово-механічних

спостережуваних молекулярних систем, щоб проаналізувати хімічні реакції наноматеріалів та розв'язати кінетичну систему.

О та інші успішно застосували метааналіз для вивчення хімічної токсичності квантових точок. Вони використовували аналіз тексту для отримання відповідних даних про токсичність КТ з 307 досліджень у літературі та застосовували модель випадкової регресії для аналізу даних. Відповідно до їх результатів токсичність була тісно пов'язана з такими властивостями поверхні, як оболонка, ліганд та модифікація поверхні, діаметр, тип аналізу та час впливу КТ.

### 2.7.3 Прогнозування молекулярних властивостей

Функціональні розрахунки щільності пропускної здатності для прогнозування молекулярних властивостей є досить довготривалими. Як альтернативний спосіб машинного навчання він є можливим підходом для швидкого прогнозування структур або властивостей молекул, сполук та матеріалів, крім того, він може реалізувати високу точність отриманих результатів.

ElemEnt - це модель, яка базується на глибоких нейронних мережах, що приймає елементи як вхідні дані для прогнозування властивостей матеріалу. Він автоматично вилучає фізичні та хімічні взаємодії та подібності між елементами та робить швидкі та точні прогнози.

Подібно до ElemEnt, Chemception - це модель, яка базується на згортковій нейронній мережі, яка перетворює вихідні дані сполук у 2D-зображення для прогнозування токсичності, активності та сольватаційних властивостей.

Крім того, Уорд та ін. запропонували загальну систему машинного навчання для прогнозування властивостей неорганічних матеріалів. Ця модель може бути застосована для прогнозування різноманітних властивостей кристалічних і аморфних матеріалів, такі як енергія зазору та здатність до формування скла.

Машинне навчання широко застосовувалося при прогнозуванні властивостей, відкритті нових матеріалів та дослідженні квантової хімії завдяки потужним показникам прогнозування та відносно низькій обчислювальній

вартості. Однак, застосування машинного навчання в матеріалознавстві все ще стикається з багатьма проблемами.

Наприклад, наявні високоякісні дані, які пов'язані з матеріалами є недостатніми, властивості досліджуваних матеріалів важко уявити ідеальними, а також передбачена точність нижча, ніж точність розрахунків теорії функціональної щільності. По-перше, прискорення побудови матеріальної бази даних є надзвичайно важливим для майбутнього розвитку машинного навчання. Кількість та якість даних безпосередньо впливають на точність машинного навчання.

Наукова література та експериментальні записи містять велику кількість матеріальних даних, до яких може застосовуватися машинне навчання, наприклад, молекулярні властивості, умови реакції та синтетичні рецептури.

Використовуючи інтелектуальний аналіз тексту, можна швидко зібрати ці корисні дані, розкидані по статтях, журналах і виданнях, що істотно збагатить існуючі бази даних матеріалів і дозволить створювати спеціалізовані бази даних.

По-друге, встановлення нових принципів машинного навчання має важливе значення. З розвитком глибокого навчання і заміни ручного проектування функцій, вихідні дані будуть представлені більш ефективно в майбутньому.

Однак експерти досі не розуміють на якій основі глибокі нейронні мережі вибирають ознаки та значення вибраних ознак. Це робить результати глибокого навчання недостатньо переконливими і не дає широко описаної теорії для використання.

Спроба зрозуміти, що відбувається всередині "чорної скриньки", не тільки посилює узагальненість машинного навчання в матеріалознавстві, але також сприяє виявленню законів природи, які невідомі людині.

По-третє, квантова хімія може бути ще одним ключовим застосуванням машинного навчання. Потужна можливість обробки даних машинного навчання дозволяє йому вирішувати багато проблем в квантовій хімії. Поєднання теорії функціональної щільності з машинним навчанням може істотно підвищити точність прогнозування моделі. Це може бути потужним інструментом для

прогнозування складних властивостей і структур молекул, для дослідження систем квантових багатотіл та для виявлення нових матеріалів.

Машинне навчання все ще не може реалізувати очікувану точність при застосуванні до деяких завдань через недостатній матеріал даних. Тому, більш точна модель, яка була навчена на невеликому, але точному наборі даних в деяких випадках є абсолютно необхідною.

Виконання моделі глибокого навчання, яка пройшла навчання з невеликого набору даних розміром 4000 зразків була достатньо представлена.

## 2.8 Градієнтний бустинг

Бустинг- це метод перетворення слабких ланок в сильні. При форсуванні кожне нове дерево поміщається в модифіковану версію вихідного набору даних. Алгоритм підвищення градієнта (gbm) найлегше пояснити, спочатку ввівши алгоритм AdaBoost. Алгоритм AdaBoost починається з навчання дерева рішень, в якому кожному спостереженню присвоюють «рівну вагу». Після оцінки першого дерева ми збільшуємо «вагу» тих спостережень, які важко класифікувати, і знижуємо вагу тих спостережень, які легко класифікувати.

Тому друге дерево «вирощується» на цих зважених даних. Ідея полягає в тому, щоб поліпшити передбачення першого дерева. Тому новою моделлю є Дерево 1 + Дерево 2. Потім обчислюємо помилку класифікації з цієї нової моделі ансамблю з двох дерев і вирощуємо третє дерево, щоб передбачити переглянуті залишки. Будемо повторювати цей процес для заданої кількості ітерацій. Наступні дерева допомагають нам класифікувати спостереження, які погано класифікуються попередніми деревами. Таким чином, передбачення остаточної моделі ансамблю є зваженою сумою передбачень, зроблених попередніми моделями дерев.

Градієнт бустингу навчає багато моделей поступовим, адитивним і послідовним чином. Основна відмінність між алгоритмом AdaBoost і алгоритмом градієнтного підвищення кваліфікації полягає в тому, як ці два алгоритму виявляють недоліки слабких учнів (наприклад, дерева прийняття рішень), у той час як модель AdaBoost ідентифікує недоліки за допомогою високонавантажених точок

даних, градієнтне прискорення виконує те ж саме за допомогою градієнтів в функції втрат

$$y = ax + b + e \quad (2.4)$$

де  $e$  вимагає особливої уваги, так як це термін помилки вимагає особливої уваги, так як це термін помилки.

Функція збитків - це показник, який вказує на те, наскільки гарними є коефіцієнти моделі у відповідності до базових даних. Логічне розуміння функції збитків збуде залежати від того, що намагаються оптимізувати.

Однією з найбільших мотивацій використання градієнтного підсилення є те, що це дозволяє оптимізувати функцію витрат, яку визначає користувач, замість функції втрат, яка, як правило, пропонує менший контроль і, по суті, не відповідає реальним додаткам.

Підсилення дерева градієнта або посилення градієнта деревами прийняття рішень - це узагальнення підвищення до довільних диференційованих функцій втрат. Посилення градієнта деревами прийняття рішень - це точна та ефективна готова процедура, яка може бути використана як для регресії, так і для проблем класифікації в різних сферах, включаючи рейтинг веб-пошуку та екологію.

`GradientBoostingClassifier` підтримує як двійкову, так і багатокласову класифікацію. Кількість слабких учнів (тобто дерев регресії) контролюється параметром `n_estimators`; Розмір кожного дерева можна контролювати, встановлюючи глибину дерева за допомогою `max_depth`, або встановлюючи кількість листових вузлів за допомогою `max_leaf_nodes`. Швидкість навчання - це гіперпараметр в діапазоні  $(0,0, 1,0]$ , який контролює переобладнання за допомогою усадки.

`GradientBoostingRegressor` підтримує ряд різних функцій втрат для регресії, які можна вказати через аргумент втрати; функція втрат за замовчуванням для регресії - це найменші квадрати ('ls').

`GradientBoostingRegressor`, і `GradientBoostingClassifier` підтримують `warm_start = True`, що дозволяє додавати більше оцінювачів до вже встановленої моделі.

## 2.8.1 Контроль розміру дерева

Розмір тих даних, які вивчаються на основі дерева регресії, визначає рівень змінних взаємодій, які можуть бути зафіксовані моделлю посилення градієнта. Загалом, дерево глибини  $h$  може фіксувати взаємодії порядку  $h$ . Існує два способи контролю розміру окремих дерев регресії.

Крім того, ви можете контролювати розмір дерева, вказавши кількість листових вузлів за допомогою параметра `max_leaf_nodes`. У цьому випадку дерева вирощуватимуть за допомогою найкращого першого пошуку, де спочатку будуть розширені вузли з найвищим покращенням домішок. Дерево з `max_leaf_nodes = k` має  $k - 1$  розділених вузлів і, отже, може моделювати взаємодії до порядку `max_leaf_nodes - 1`.

Було виявлено, що `max_leaf_nodes = k` дає порівнянні результати з `max_depth = k-1`, але значно швидше тренується за рахунок трохи більшої похибки в навчанні. Параметр `max_leaf_nodes` відповідає змінній  $J$  у главі про посилення градієнта в [F2001] і пов'язаний із параметром `interaction.depth` у пакеті R's `gbm`, де `max_leaf_nodes == interact.depth + 1`.

Регресори ДРГБ - адитивні моделі, передбачення яких  $y_i$  для даного вводу  $x_i$  має такий вигляд

$$\hat{y}_i = F_M(x_i) = \sum_{m=1}^M h_m(x_i) \quad (2.5)$$

де  $h_m$  є оцінювачами, які називаються слабкими учнями в контексті підвищення. Градієнт бустингу дерева використовує регресори дерева рішень фіксованого розміру як слабких учнів. Константа  $M$  відповідає параметру `n_estimators`.

Подібно до інших алгоритмів посилення, дерево рішення градієнтного бустингу будується щільно:

$$F_m(x) = F_{m-1}(x) + h_m(x) \quad (2.6)$$

де нещодавно додане дерево  $h_m$  встановлюється для мінімізації суми збитків  $L_m$  з огляду на попередній ансамбль  $F_{m-1}$

$$h_m = \arg \min_h L_m = \arg \min_h \sum_{i=1}^n l(y_i, F_{m-1}(x_i) + h(x_i)) \quad (2.7)$$



де  $l(y_i, F(x_i))$  визначається параметром втрат.

За замовчуванням початковою моделлю вибирають константу  $F_0$ , яка мінімізує втрати: для втрат із найменшими квадратами це емпіричне середнє значення цільових значень. Початкову модель також можна вказати за допомогою аргументу `init`.

Використовуючи наближення Тейлора першого порядку, значення  $l$  можна наблизити наступним чином:

$$l(y_i, F_{m-1}(x_i) + h_m(x_i)) \approx l(y_i, F_{m-1}(x_i)) + h_m(x_i) \left[ \frac{\partial l(y_i, F(x_i))}{\partial F(x_i)} \right]_{F = F_{m-1}} \quad (2.8)$$

Кількість  $\left[ \frac{\partial l(y_i, F(x_i))}{\partial F(x_i)} \right]_{F = F_{m-1}}$  є похідною втрати відносно її другого параметра, оціненого за  $F_{m-1}(x)$

Це легко обчислити для будь-якого даного  $F_{m-1}(x)$  у закритій формі, оскільки втрата диференціюється. Ми позначимо це як  $g_i$ .

Видаляючи постійні доданки, маємо:

$$h_m = \arg \min_h \sum_{i=1}^n h(x_i) g_i \quad (2.9)$$

Посилення градієнта для класифікації дуже схоже на випадок регресії. Однак сума дерев  $F_M(x_i) = \sum_m h_m(x_i)$  не є однорідним з передбаченням: він не може бути класом, оскільки дерева передбачають безперервні значення.

Зіставлення зі значення  $F_m(x_i)$  до класу або ймовірність залежить від збитків. Для девіації (або втратиданих) імовірність, яка належить до позитивного класу, моделюється як  $p(y_i = 1 | x_i) = \sigma(F_M(x_i))$ , де  $\delta$ - сигмоїдна функція.

Для багатокласової класифікації  $K$  дерева (для  $K$  класів) будуються на кожній з ітерацій. Імовірність, що належить до класу  $k$ , моделюється як програмний максимум значень  $F_{M,k}(x_i)$ .

Зауважте, що навіть для завдання з класифікації,  $h_m$  субоцінювач все ще є регресором, а не класифікатором. Це пов'язано з тим, що субоцінювачі навчені прогнозувати негативні градієнти, які завжди є безперервними величинами.

## 2.9 Параметри алгоритму машинного навчання

**Alpha** *float, default=0.75*

Альфа-квантиль функції втрати губера та функція квантилів втрат. Тільки якщо `loss = 'huber'` або `loss = 'quantile'`. В даній роботі було використано значення 0,75, а значення для порівняння – 0,9. Цей параметр використовується для згладжування додаткового параметру Лапласа/Ландстоуна.

**csr\_alpha** *non-negative float, default=0.0*

Параметр складності, що використовується для обрізки мінімальних витрат та складності. Буде вибрано піддерево з найбільшою складністю витрат, меншою за `csr_alpha`. За замовчуванням обрізка не проводиться. В роботі було використано стандартне значення цього параметру

**criterion** *{'friedman\_mse'}, default='friedman\_mse'*

Функція вимірювання якості розбиття. Підтримуваний критерій «`friedman_mse`» для середньої квадратичної помилки з оцінкою покращення за Фрідманом. Значення за замовчуванням "friedman\_mse", як правило, найкраще, оскільки воно може забезпечити кращу апроксимацію в деяких випадках. Тому із 3-х доступних критеріїв був обраний саме цей критерій, щоб оцінити значення середньої квадратичної помилки.

**Init** *estimator or 'zero', default=None*

Об'єкт оцінювача, який використовується для обчислення початкових прогнозів. `init` повинен забезпечити придатність та передбачити. Якщо значення «нуль», початкові вихідні прогнози встановлюються рівними нулю. За замовчуванням використовується `DummyEstimator`, який передбачає або середнє цільове значення (для втрати = 'ls'), або квантиль для інших втрат. Був обрано значення `None`, як і попередньому дослідженні, оскільки не надано інформацію про те, що це може бути значення рівне 0.

**learning\_rate** *float, default=0.1*

швидкість навчання зменшує внесок кожного дерева за рахунок `learning_rate`. Існує компроміс між швидкістю навчання та оцінками `n`. Швидкість навчання була обрана такою ж, як і в попередньому досліді.

**loss**{*'ls', 'lad', 'huber', 'quantile'*}, *default='ls'*

функція втрат, яку слід оптимізувати. "Huber" - це поєднання двох функцій. За умови дослідження було обране поєднання двох функцій для кращої оптимізації даних, а у попередньому дослідженні була обрана функція втрат Is -регресія найменших квадратів.

**max\_depth** *int, default=9*

Максимальна глибина індивідуальних оцінювачів регресії. Максимальна глибина обмежує кількість вузлів у дереві. Налаштуйте цей параметр для найкращої роботи; найкраще значення залежить від взаємодії вхідних змінних. Відповідно до вхідних змінних даного дослідження було обране значення 9, а у попередньому дослідженні максимальна глибина становила 3. Це означає, що у вказаному дослідженні була більша кількість вузлів даних, ніж у попередньому.

**max\_features**{*'auto', 'sqrt', 'log2'*}, *int or float, default=0.4*

Кількість функцій, які слід враховувати при пошуку найкращого розділення: Якщо це *int*, тоді враховуйте функції *max\_features* при кожному розділенні.

Якщо *float*, тоді *max\_features* є часткою, а функції *int (max\_features n\_features)* враховуються при кожному розділенні.

Якщо "auto", то *max\_features = n\_features*.

Якщо "sqrt", то *max\_features = sqrt (n\_features)*.

Якщо "log2", то *max\_features = log2 (n\_features)*.

Якщо *None*, то *max\_features = n\_features*.

Вибір *max\_features <n\_features* веде до зменшення дисперсії та збільшення упередженості.

Примітка: пошук розбиття не зупиняється, поки не буде знайдено принаймні один дійсний розділ зразків вузла, навіть якщо для цього потрібно ефективно перевірити більше функцій *max\_features*.

У цьому дослідженні було обрано значення 0,4 і *int or float*, а у попередньому дослідженні значенні *None*. Це означає, що при невизначеному значенні кількість функцій, які слід враховувати при пошуку найкращого розділення буде

дорівнювати кількості ознак кожного зразку, а при значенні `int` or `float` – ця кількість функцій буде рахуватися лише при кожному розділенні даних.

**`max_leaf_nodes`** *int, default=None*

Вирощуйте дерева за допомогою `max_leaf_nodes` найкращим чином. Найкращі вузли визначаються як відносне зменшення домішок. Якщо `None`, то необмежена кількість листових вузлів. Значення `None` було обране і в данному дослідженні, і в попередньому дослідженні, що свідчить про необмежену кількість вузлів даних.

**`min_impurity_decrease`** *float, default=0.0*

Вузол буде розділений, якщо цей розкол спричинить зменшення домішки більше або дорівнює цьому значенню.

Рівняння зваженого зменшення домішки є наступним:

$$\frac{N_t}{N} \cdot (\text{impurity} - N_{t_R}/N_t \cdot \text{right\_impurity} - N_{t_L}/N_t \cdot \text{left\_impurity}) \quad (2.10)$$

де  $N$  - загальна кількість зразків,  $N_t$  - кількість зразків у поточному вузлі,  $N_{t_L}$  - кількість зразків у лівій дочірній організації, а  $N_{t_R}$  - кількість зразків у правій дочірній організації.

$N$ ,  $N_t$ ,  $N_{t_R}$  і  $N_{t_L}$  посилаються на зважену суму, якщо передано зразкову вагу.

**`min_impurity_split`** *float, default=None*

Поріг для ранньої зупинки в рості дерев. Вузол розколеться, якщо його домішка перевищує поріг, інакше це лист. Поріг для ранньої зупинки не є визначеним для обох досліджень.

**`min_samples_leaf`** *int or float, default=4*

Мінімальна кількість зразків, яка повинна знаходитися на листовому вузлі. Точка розбиття на будь-якій глибині буде враховуватися лише в тому випадку, якщо вона залишає принаймні `min_samples_leaf` навчальних зразків у кожній з лівої та правої гілок. Це може мати ефект згладжування моделі, особливо при регресії.

Якщо `int`, тоді розгляньте `min_samples_leaf` як мінімальну кількість.

Якщо плаваючий, тоді `min_samples_leaf` - це дріб, а `ceil(min_samples_leaf * n_samples)` - це мінімальна кількість зразків для кожного вузла.

Мінімальна кількість зразків у першому дослідженні складає 1, в той час як у цьому дослідженні значення дорівнює 4, що покращує ефект згладжування моделі при регресії.

**min\_samples\_split** *int or float, default=2*

Мінімальна кількість зразків, необхідних для розділення внутрішнього вузла: Якщо *int*, тоді розгляньте *min\_samples\_split* як мінімальну кількість.

Якщо плаваючий, тоді *min\_samples\_split* - це дріб, а *ceil (min\_samples\_split \* n\_samples)* - це мінімальна кількість зразків для кожного розділення. У обох дослідженнях було присвоєно цьому значенню значення 2.

**min\_weight\_fraction\_leaf** *float, default=0.0*

Мінімальна зважена частка загальної суми ваг усіх вхідних зразків, яка повинна знаходитися на листовому вузлі. Зразки мають однакову вагу коли не вказано *sample\_weight*. Можливо зробити висновок, що зразки мають однакову вагу як і в попередньому дослідженні, так і в даному дослідженні.

**n\_estimators** *int, default=50*

Кількість підсилювальних етапів для виконання. Посилення градієнта досить надійне до надмірного припасування, тому велика кількість зазвичай призводить до кращої продуктивності. Значення у цьому дослідженні вдвічі менші за значення у попередньому дослідженні, що вказує на знижену продуктивність даних.

**n\_iter\_no\_change** *int, default=None*

*n\_iter\_no\_change* використовується, щоб вирішити чи використовуватиметься рання зупинка для припинення навчання, коли оцінка перевірки не покращується. За замовчуванням встановлено значення *None*, щоб вимкнути ранню зупинку. Якщо встановити число, він відмінить валідаційний\_фракційний розмір навчальних даних як перевірку та припинить навчання, коли оцінка валідації не покращується у всіх попередніх числах ітерацій *n\_iter\_no\_change*. В обох дослідженнях обраний параметр невизначено.

**Presort** *deprecated, default='deprecated'*

Цей параметр застарілий і буде видалений у версії 0.24.

**random\_state** *int or RandomState, default=None*

Керує початковим випадковим значенням, даним кожному оцінювачу Дерева на кожній посилювальній ітерації. Крім того, він керує випадковою перестановкою функцій при кожному розбитті. Він також контролює випадкове розділення навчальних даних для отримання набору перевірки, якщо `n_iter_no_change` не `None`. Передає `int` для відтворюваного виводу через кілька викликів функцій. В обох дослідженнях обраний параметр `None`.

**Subsample** *float, default=0.6000000000000001*

Частка зразків, яка буде використана для підгонки індивідуальних базових ланок. Якщо значення менше 1,0, це призводить до посилення стохастичного градієнта, підвибірка взаємодіє з параметром `n_estimators` як у данному дослідженні. Вибір підпроби  $<1,0$  призводить до зменшення дисперсії та збільшення зміщення як у попередньому дослідженні.

**Tol** *float, default=1e-4*

Толерантність до ранньої зупинки. Коли втрата не покращується принаймні за ітерації `n_iter_no_change` (якщо встановлено число), навчання припиняється.

**validation\_fraction** *float, default=0.1*

Частка навчальних даних, яку слід відкласти як перевірку, встановлену для ранньої зупинки. Має бути від 0 до 1. Використовується лише в тому випадку, якщо для `n_iter_no_change` встановлено ціле число. Це значення однакове в обох дослідженнях.

**Verbose** *int, default=0*

Увімкнути детальний вихід. Якщо 1, то час від часу виникає прогрес і продуктивність - чим більше дерев, тим нижча частота. Якщо значення більше 1, воно відображає прогрес і продуктивність для кожного дерева. Це значення однакове в обох випадках.

**warm\_start** *bool, default=False*

Якщо встановлено значення "True", повторно використовуйте рішення попереднього виклику, щоб підігнати і додати більше оцінювачів до ансамблю, інакше просто видалить попереднє рішення. Це значення співпадає в обох випадках.

### РОЗДІЛ 3. АНАЛІЗ ВИСОКОЕНТРОПІЙНОСТІ СПЛАВІВ

При наявності 5 і більше компонентів у рідкому або повністю твердому розчині характерною ознакою буде наявність високої конфігураційної ентропії. Для визначення високоентропійності сплавів дослідники запропонували ввести значення конфігураційної ентропії, яке буде більше за  $1,5R$  (де  $R$  - газова константа)

Високоентропійні сплави можуть мати різні фазові склади, включаючи тверді розчини, інтерметалічні сполуки або навіть аморфну фазу, залежно від складу сплаву та швидкості охолодження, якщо вони отримані за рахунок затвердіння. Далі буде розглянуто вплив параметрів на формування розчинів, інтерметалідів та аморфних фаз у високоентропійних сплавах. Важливим аспектом є використання параметричного підходу, який включає в себе невідповідність атомних розмірів, ентальпію змішування, ентропію змішування та температуру плавлення. Ці фізико-хімічні параметри можна розумно використовувати для прогнозування формування різних фаз.

Якщо кінетичні фактори не задіяні, фазоутворення термодинамічно контролюється вільної енергією Гіббса -  $G$ , яка пов'язана з ентальпією  $H$  і ентропією  $S$  через наступне рівняння в разі утворення сплавів шляхом змішування елементарних складових частин:

$$\Delta G_{mix} = \Delta H_{mix} - T\Delta S_{mix} \quad (3.1)$$

Іншим важливим ефектом при розгляді фазоутворення є ефект геометрії або, більш конкретно, ефект розміру атомів. Ефект атомного розміру чітко сформульований як у класичних правилах Юма-Розері для формування бінарних твердих розчинів, так і в трьох знаменитих емпіричних правилах Іноуе для формування об'ємних металевих стекол.

При встановленні правил формування фаз для сплавів з високою ентропією застосовується параметричний підхід, тобто дослідження формування фаз включає в себе вибір параметрів, які пов'язані з термодинамікою та геометрією.

На рисунку 3.1 показана схема вибору фаз для багатокомпонентних сплавів, включаючи ВЕС та МС, на основі ентальпії змішування  $\Delta H_{\text{mix}}$  та різниці атомних розмірів Delta ( $\delta$ ). Тут  $\delta$  визначається як

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^N x_i (1 - d_i / \sum_{j=1}^N x_j d_j)^2} \quad (3.2)$$

де  $N$  - кількість елементів,  $x_i$  або  $x_j$  - склад  $i$ -го або  $j$ -го елемента, а  $d_i$  або  $d_j$  - атомний діаметр  $i$ -го або  $j$ -го компонента. Ентальпію змішування  $\Delta H_{\text{mix}}$  для багатокомпонентних сплавів можна оцінити за

$$\Delta H_{\text{mix}} = \sum_{i=1, i \neq j}^N 4\Delta H_{AB}^{\text{mix}} x_i x_j \quad (3.3)$$

де  $\Delta H_{AB}^{\text{mix}}$  - ентальпія змішування для бінарних еквіатомних сплавів АВ. Експериментально розраховані  $\Delta H_{\text{mix}}$  та  $\delta$  для обраних високоентропійних сплавів зазначені на рис. 3.1. На рисунку 3.1 показано ймовірність утворення однофазних високоентропійних сплавів. З найбільшою ймовірністю утворення однофазних структур показані світлішим кольором. Можливо зазначити, що перелічені фази в основному можна виявити за допомогою дифракції рентгенівських променів, і вони не обов'язково включають усі фази, що існують у перелічених сплавах. Прогнозується, що сплави з високим коефіцієнтом однофазності утворюють твердий неупорядкований розчин.

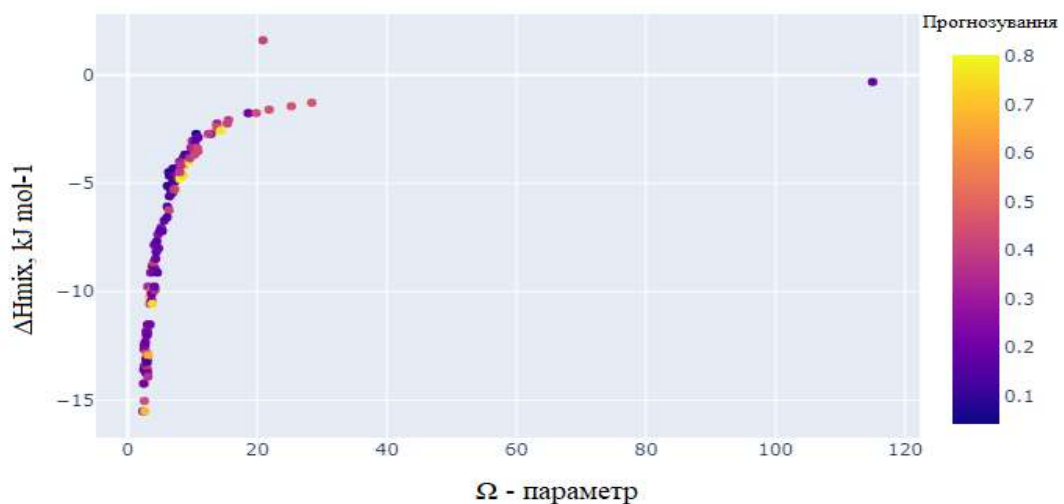


Рисунок 3.1 — Ймовірність утворення однофазних ВЕС  $\Delta H_{\text{mix}}$  і параметром  $\Omega$



Відповідно до середнього квадратичного відхилення ковалентного радіусу свідчать про утворення однофазних високоентропійних сплавів, але складно сказати по цьому параметру чи буде це ОЦК чи ГЦК структура.

Можливо зазначити, що всі згадані тут конфігураційні ентропії розраховуються для ВЕС, припускаючи, що вони перебувають у рідкому або повністю випадковому стані твердого розчину (тобто, використовуючи рівняння Больцмана):

$$\Delta S_{mix} = -R \sum_{i=1}^N x_i \ln x_i \quad (3.4)$$

Новий параметр,  $\Omega$ , що поєднує вплив  $\Delta S_{mix}$  та  $\Delta H_{mix}$  на стабільність багатокомпонентного твердого розчину, був нещодавно запропонований Ян і Чжаном [33]. Параметр  $\Omega$  визначається як

$$\Omega = \frac{T_m \Delta S_{mix}}{|\Delta H_{mix}|} \quad (3.5)$$

$$T_m = \sum_{i=1}^N x_i (T_m)_i \quad (3.6)$$

де  $T_m$  - середня температура плавлення сплаву  $N$ -елемента, а  $(T_m)_i$  - температура плавлення  $i$ -го компонента сплаву. Було встановлено, що різниця атомних розмірів є домінуючим фактором при виборі типу інтерметалічної фази.

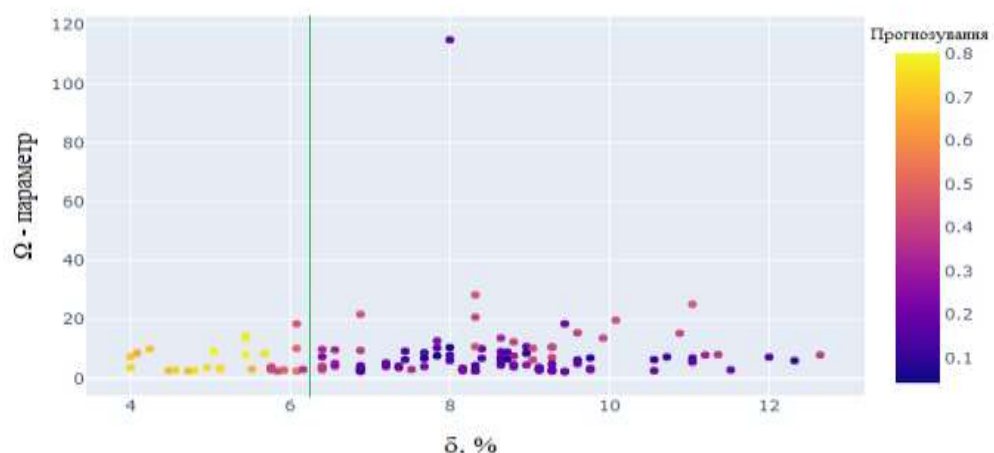


Рисунок 3.2 — Залежність кристалічних структур від ентальпії змішування  $\Delta H_{mix}$  та значення середньоквадратичного відхилення  $\delta$

Аналізуючи фазоутворення з використанням параметрів  $\Omega$  і середнього значення ковалентного радіуса різних змодельованих багатокомпонентних сплавів (показано в рис.3.2), були запропоновані уже досліджені критерії формування фаз твердого розчину у ВЕС:  $\Omega = 1,1$  та  $\delta = 6,6\%$ , де I – область формування однофазного твердого розчину, II – область формування аморфних та двофазних структур

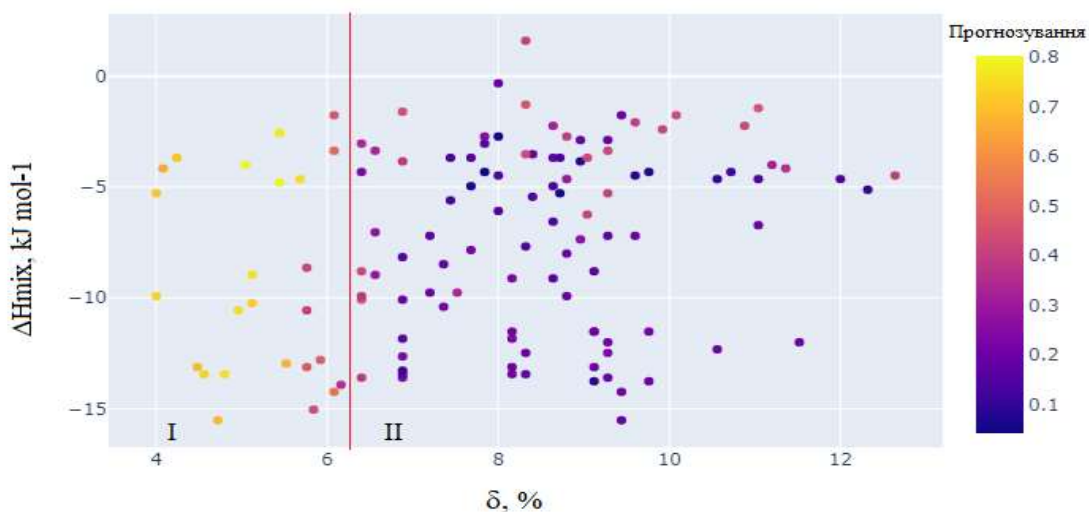


Рисунок 3.3 — Залежність кристалічних структур від ентальпії змішування  $\Delta H_{\text{mix}}$  та значення середньоквадратичного відхилення  $\delta$

Діаграма  $\delta - \Delta H_{\text{mix}}$ , показана на рис. 3.3, вказує на те, що тверді розчини типу ГЦК утворюються при досить малій  $\delta$ , а тверді розчини ОЦК утворюються при більшій  $\delta$ , припускаючи, що  $\Delta H_{\text{mix}}$  все ще задовольняє умовам утворення твердих розчинів

Однак твердий розчин типу ГЦК, що утворює  $\delta$ , в значній мірі перекривається з діапазоном твердих розчинів ОЦК, що практично означає, що  $\delta$  має обмежене використання з точки зору контролю за утворенням високоентропійних сплавів у структурі ГЦК або ОЦК. Для цієї важливої мети потрібно встановити параметри.

По-перше, у твердому розчині, що утворює високоентропійні сплави, фази ОЦК стабілізуються при нижчому КВЕ, тоді як фази ГЦК стабілізуються при більш високому КВЕ. У проміжних значеннях КВЕ існують як ГЦК, так і ОЦК фази, де

КВЕ <6,87 і суміш ГЦК та ОЦК фаз при КВЕ <8. Відповідно до проведеного дослідження було отримано значення для суміші ОЦК і ГЦК при КВЕ <7,8.

Існують деякі винятки, особливо для ВЕС з вмістом Mn. Правило КВЕ забезпечує зручний спосіб розробки ГЦК або ОЦК структурованих ВЕС, що містять переважно елементи ТМ, з точки зору концентрації електронів і його достовірність широко підтверджена наступними експериментами після його публікації.

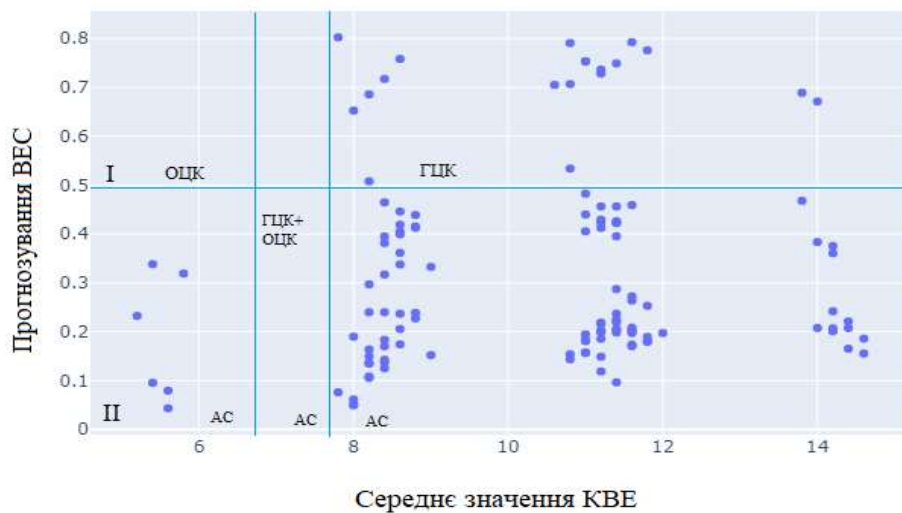


Рисунок 3.4 — Залежність прогнозування ВЕС від середнього значення концентрації валентних елетронів

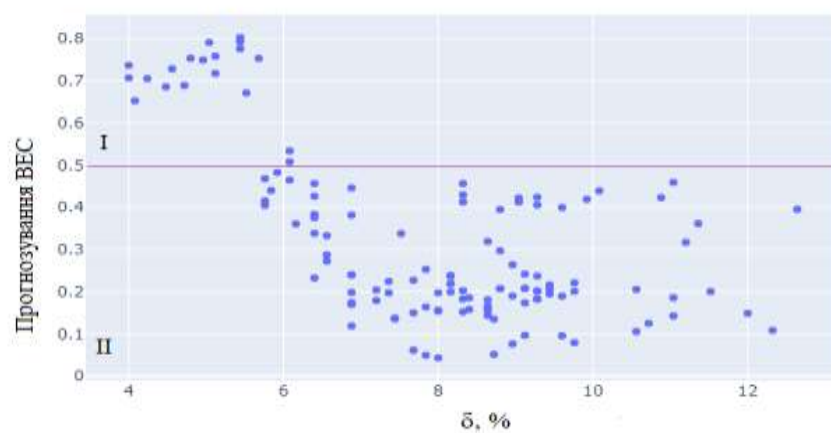


Рисунок 3.5 — Залежність прогнозування ВЕС значення від  $\delta, \%$

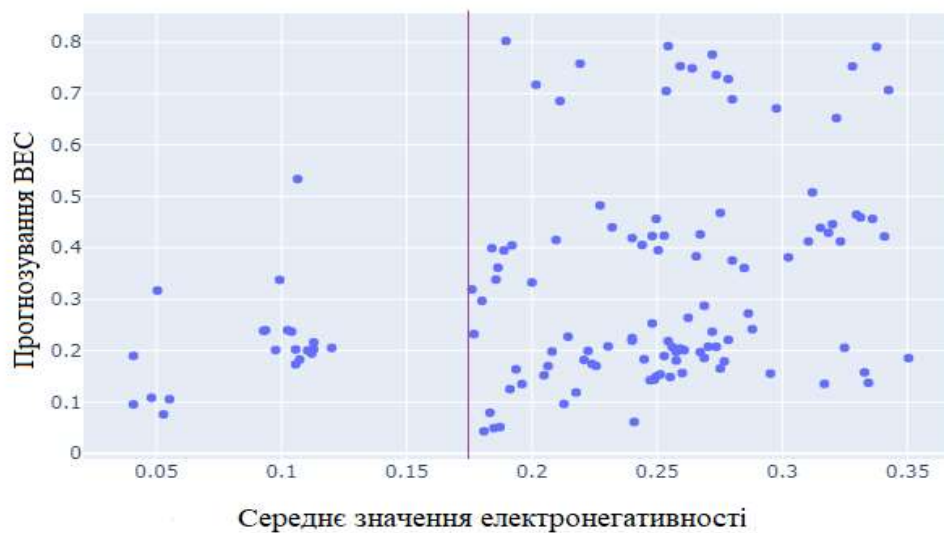


Рисунок 3.6 — Залежність прогнозування високоентропійності сплаву від середнього значення електронегативності

Однофазні структури утворюються при середньому значенні електронегативності вище 0,17

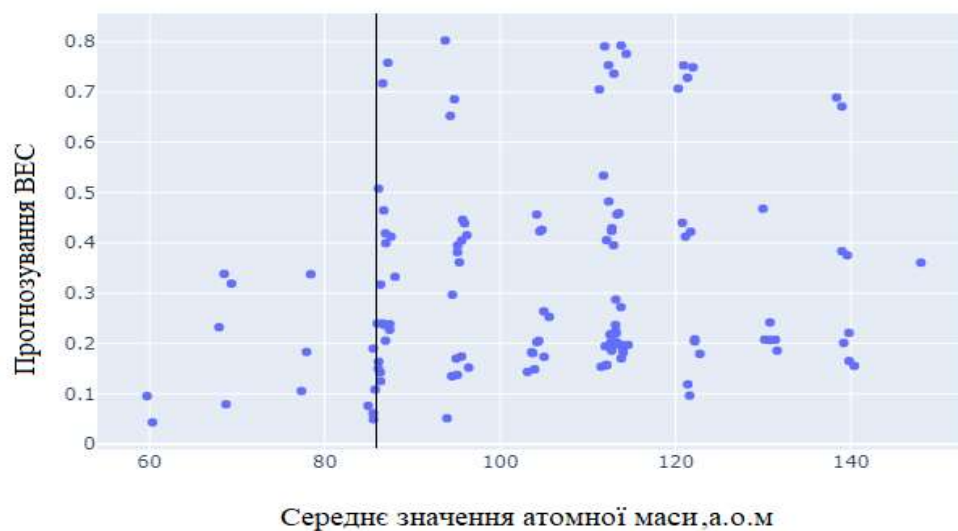


Рисунок 3.7 — Залежність прогнозування високоентропійності сплаву від середнього значення атомної маси



серед елементів у складі, значення максимального ковалентного радіусу, середня кількість заповнених валентних s орбіталей серед елементів у складі, максимальне значення атомної маси, середня кількість незаповнених валентних p орбіталей серед елементів, середня кількість незаповнених валентних s орбіталей серед елементів

Найважливішими показниками є середньоквадратичне відхилення від середнього радіуса атому (24%), середнє значення валентності атомів на всіх орбіталях (7%), кількість валентних електронів серед елементів (7%), діапазон середнього ковалентного радіусу серед елементів у складі (4%).

Нинішні та майбутні ВЕС мають потенціал для використання. Крім того, можливо, що ВЕС мають потенціал відкрити нову дослідницьку область, використовуючи унікальні властивості ВЕС у найближчому майбутньому.

## РОЗДІЛ 4. ТЕХНІКА БЕЗПЕКИ ПРИ РОБОТІ З ПЕРСОНАЛЬНИМ КОМП'ЮТЕРОМ І ОХОРОНА ПРАЦІ НА ПІДПРИЄМТСВІ

### 4.1. Загальні положення

4.1.1 Користувачу персонального комп'ютеру (ПК) під час його використання потрібно обов'язково слідувати вимогам інструкції з охорони праці.

4.1.2 До самостійної роботи на персональних комп'ютерах можуть бути допущені особи, які пройшли обов'язковий медичний огляд (попередній - під час оформлення на роботу та періодичний - на протязі трудової діяльності) та не мають медичних протипоказань по експлуатації ПК; засвоїли навички роботи на ПК; пройшли спеціальні інструктажі з питань охорони праці (вступний, первинний, періодичний один раз на півріччя).

4.1.3 До складу персонального комп'ютера входить монітор, системний блок, пристрій для друку, сканер, модем та інші спеціальні периферійні пристрої.

Під час експлуатації ПК на користувача можуть впливати такі шкідливі та небезпечні фактори виробництва:

- наявність робочого шуму та вібрації;
- підвищене значення напруги в електричному ланцюзі, яке може спричинити замикання через тіло людини;
- підвищений рівень статичної електрики;
- м'яке рентгенівське випромінювання на робочому місці;
- електромагнітне випромінювання;
- ультрафіолетове і інфрачервоне випромінювання;
- електростатичне поле, яке виникає між екраном і користувачем;
- пряма та відбитий відблиск від екранів
- несприятливий розподіл яскравості в полі зору користувача;

4.1.4 Основним обладнанням робочого місця користувача комп'ютера є монітор, клавіатура, робочий стіл, стілець (крісло). Робоче місце необхідно розташовувати таким чином, щоб природне світло падало на нього збоку, переважно з лівої сторони.

- 4.1.5 Робочі місця, які обладнані моніторами, необхідно розташувати таким чином, щоб уникнути попадання в очі користувача прямого світла. Джерела освітлення рекомендується розташовувати паралельно напрямку погляду з обох боків. Від світильників загального освітлення або сонячних променів необхідно використовувати захисні козирки, на вікнах - жалюзі, щоб уникнути світлові відблиски з екрана, які можуть бути спрямовані в напрямку очей користувача.
- 4.1.6 У режимі введення даних, редагування тексту та читання з екрана монітора найбільш фізіологічно коректним є зображення чорних знаків на світлому (білому) фоні.
- 4.1.7 Необхідно так розташовувати робочі екрани, щоб поверхня екрана монітора знаходилася в центрі поля зору і відстань до ока працівника повинна при цьому складати:
- при розмірі екрану по діагоналі
- 35/38 см - 600 - 700 мм;
  - 43 см - 700 - 800 мм;
  - 48 см - 800 - 900 мм.
- 4.1.8 Приміщення з ПК повинні мати штучне і природне освітлення. Вікна робочих приміщень повинні містити жалюзі, штори, зовнішні козирки і мати регульовальні пристрої для відкривання.
- 4.1.9 При роботі на комп'ютері зручна робоча поза забезпечується регулюванням висоти робочого сидіння (стільця, крісла). Висота робочої поверхні столу для ВДТ має бути в межах 680 – 800 мм.
- 4.1.10 Для підтримки допустимих значень концентрації позитивних та негативних іонів, мікроклімату досить важливо у робочому приміщенні збільшувати вологість повітря за допомогою зволожувачів для кімнати.
- 4.1.11. Батареї для опалення, водопровідні труби мають бути надійно захищені діелектричними щитками або сітками від випадкового дотику.
- 4.1.12. Необхідно кожного дня проводити вологе прибирання у приміщеннях, де розташовані ПК.



- 4.1.13. Важливим фактором є оснащене переносним вуглекислотним вогнегасником приміщення з ПК.
- 4.1.14. Рівень освітлення має бути в межах 300 – 500 лк на робочому столі в зоні розташування документів.
- 4.1.15. ПК мусить підключатися до електромережі тільки з допомогою справних штепсельних з'єднань і електророзеток заводського виготовлення.
- 4.1.16. Є неприпустимим:
- експлуатація кабелів та проводів з ізоляцією, яка є пошкодженою або втратила захисні властивості за час використання; заборонено залишати кабелі та проводи з неізольованими провідниками під напругою;
  - застосування подовжувачів, які зроблені своїми руками;
  - застосування для опалення приміщення електронагрівального обладнання, яке є несертифікованим(зроблено самостійно);
  - користування розетками, вимикачами та іншими електровиробами, які знаходяться в пошкодженому стані;
- 4.1.17. Відстань між бічними поверхнями моніторів ПК не може становити менше ніж 1,2 м. Відстань між тильною поверхнею одного монітора та екраном іншого має сягати не менше ніж 2,5 м.
- 4.1.18. Конструкція робочого місця користувача ПК(за умов сидячої роботи) має досягти підтримання з такими ергономічними характеристиками робочої пози: ступні ніг на спеціальній підставці для ніг або на підлозі; стегна мають розміщуватися в горизонтальній площині; передпліччя - вертикально до робочої поверхні; лікті мають знаходитися відповідно до вертикальної площини не менше ніж під кутом 70-90 °; кут згинання для зап'ясть може сягати не більше, ніж 20° по відношенню до горизонтальної площини, кут нахилу голови по відношенню до вертикальної площини може знаходитися в межах 15-20° .
- 4.1.19. Якщо працівниками буде скоєно порушення вищевказаних норм, за таких умов може бути прийнято притягнення до відповідальності згідно з чинним законодавством України.

## 4.2. Вимоги безпеки перед початком роботи

- 4.2.1. Перед початком роботи користувач ПК має ряд зобов'язань, а саме :
- перевірити стан апаратури в загальному вигляді;
  - перевірити чи є справною електропроводка, штепсельні вилки, заземлення, розетки тощо.
  - перевірити на робочому столі чи надійно встановлено апаратуру;
  - відрегулювати освітленість робочого місця;
  - провести ретельне очищення екрану персонального комп'ютера від навіяних забруднень, пилу спеціально розробленою для цього салфеткою.
  - перевірити правильність встановлення столу, сидіння, положення обладнання.
- 4.2.2. При включенні персонального комп'ютеру необхідно дотримуватися послідовності ввімкнення ,а саме блок живлення, монітор, принтер, сканер та інше, системний блок.
- 4.2.3. Перевірити на робочому місці та обладнанні наявність сторонніх предметів і їх прибрати.
- 4.2.4.Необхідно усунути відблиски на екрані ПК ,а також перевірити правильність падіння світла на робочу поверхню.
- 4.2.5.Налаштувати і зафіксувати зручне положення стільця, а також нахил спинки стільця відповідно для комфортних і затверджених вимог.
- 4.2.6. Відрегулювати яскравість роботи монітору, при цьому слід встановити мінімальний розмір світної точки, контрастність, фокусування. Не рекомендується встановлювати зображення занадто яскравим, щоб надалі не спричинити втому очей.
- 4.2.7.Якщо під час початку роботи були виявлені несправності необхідно припинити роботу за персональним комп'ютером і звернутися до керівника для усунення поломки.

### 4.3. Вимоги безпеки під час виконання роботи

4.3.1. Клавіатуру слід зафіксувати стійко, щоб не було її хитання. При цьому слід врахувати можливість її переміщень і поворотів. Згідно побажання користувача встановлюється положення клавіатури та кут її нахилу.

Під час роботи на клавіатурі сидіти прямо, не напружуватися.

4.3.2. Щоб зменшити несприятливий вплив різноманітних пристроїв ,наприклад "миша" (поза для користування якою є вимушеною, оскільки тягне за собою необхідність постійно контролювати дії) необхідно надати великий розмір столу для зручного переміщення "миші" і вільного розташування ліктявого суглоба.

4.3.3. Не дозволяються сторонні розмови, шуми, які можуть викликати подразнення.

4.3.4. За умови появи аварійної ситуації край необхідно негайно відключити ПК від електричної мережі.

4.3.4. Під час виконання різноманітних видів робіт на ПК суворо необхідно дотримуватись режимів відпочинку та праці.

4.3.5. Суворо забороняється:

- ремонтувати прилади самостійно, пошкоджувати захисні кришки апаратури. Ремонт приладів може бути виконаний тільки відповідними спеціалістами по технічному обслуговуванню персональних комп'ютерів;
- класти сторонні предмети на апаратуру комп'ютера;
- закривати сторонніми предметами вентиляційні отвори апаратури; розміщувати процесор на столі або в шафі, там де відсутній вільний доступ до повітря ,що може викликати перегрівання і виходу з ладу приладів;
- проводити прибирання апаратури ПК, коли вона є підключеною до електричної мережі;
- розташовувати посуд з рідиною поруч з апаратурою;

- включати і залишати ПК без нагляду;
- торкатися до проводів живлення, з'єднання елементів апаратури та задній панелі системного блоку під час її підключенні до електричної мережі;
- торкатися одночасно відповідно до клавіатури і монітору або процесору під час її під'єднання до електричної мережі;
- викликати попадання будь якої кількості вологи на поверхні приладів ПК;
- вимкнути живлення ПК під час активного користування;
- заставляти робоче місце паперовими носіями, щоб не виникло накопичування органічного пилу.

4.3.6. Для покращення рівня знаходження вологи у повітрі відповідного робочого приміщення з ПК необхідно проводити зволоження повітря спеціальними зволожувачами для кімнат.

4.3.7. Для зниження рівня напруженості праці на комп'ютері необхідний рівномірний розподіл і чергування характеру робіт відповідно до рівня їх складності. Задля зменшення рівня негативного впливу одноманітної роботи, не зайвим буде застосування виконання по черзі операцій введення тексту та числових даних ,тобто змінити роботу місцями, проводити редагування текстових даних та введення числових даних (зміна змісту та темпу роботи) по черзі і т. і.

При цьому рекомендовано ,щоб спостереження користувача за екраном монітору ПК не має перевищувати 4 години.

4.3.8 Шкідливий вплив виробничих факторів,які є пов'язані з роботою на комп'ютерах, можливо усунути за умови раціональної організації режиму праці і відповідних визначених перерв для відпочинку.

За умови всіх випадків, коли виробничі обставини не мають можливості надати визначені перерви, тривалість роботи без перерви з монітором не повинна перевищувати 4 години.

4.3.9. В момент визначених перерв задля зниження рівня нервово-емоційного

напруження доволі необхідно виконувати спеціальний комплекс вправ виробничої гімнастики

4.3.10. Забороняється виконувати такі дії :

- самостійно надавати обслуговування, ремонтні роботи та налагодження ПК саме на робочому місці користувача ПК;
- зберігати біля ПК паперові носії, диски, інших носіїв інформації, запасних блоки живлення, різноманітних деталей тощо, якщо вони не призначенні для використання в межах поточної роботи;
- робота з ПК, в якому під час роботи можуть з'явитися сигнали, які є нехарактерними, виникнення нестабільного зображення на екрані тощо;
- робота на матричному принтері, сканері зі повністю знятою або трішки піднятою верхньою кришкою.

4.3.11. Принтер поруч з системним блоком повинен бути розташований таким чином , щоб шнур, який з'єднує не був у натягнутому вигляді. Суворо забороняється находитися принтеру на процесорі.

4.3.12. Перед тим, як розпочати роботу принтера, необхідно переконатися в тому, що він знаходиться у зв'язку з комп'ютером.

4.3.13. Для досягнення зображень з високою роздільною здатністю ,при цьому щоб не спотворити роботу принтеру, папір, який використовується для друкування має чітко відповідати інструкційним вимогам принтеру.

Зрізи паперу виконуються за допомогою гострого леза ,щоб не спричинити задирання паперу- це зменшує імовірність зминання паперу.

4.3.14. Забороняється друкувати на папері, якщо він не відповідає вимогам, а саме :

- вага паперу перевищує рекомендовану;
- виготовлений із занадто гладкого і блискучого матеріалу, а також містить високу текстуру; із застосуванням попередньої ламінації;
- вже має надруковані дані з однієї сторони;
- порваний, зморщений або папір, який містить нерегулярні отвори, які виникли від діркопробивача чи степлера;

- використання фірмових бланків, за умови, якщо надрукований заголовок не термостійкими фарбами.

4.3.15. Застосовувати прозорі плівки. Для друку на прозорих матеріалах, а також конвертах мають бути застосовані відповідні змінні частини принтеру.

4.3.16. Забороняється:

- зберігати картридж незапакованими;
- розміщувати картридж вертикально;
- поміщати картридж етикеткою донизу;
- розпаковувати кришку валика і торкатися до нього;
- самостійно заповнювати картридж, який був використаний.

4.3.17. При скануванні документів за допомогою комп'ютера, кришка сканера повинна бути закритою, щоб запобігти травмуванню очей за допомогою яскравого світла.

4.3.18. За умови відключення електроживлення негайно припиніть роботу і повідомте керівнику робіт. Не намагайтесь самотужки виявити та усунути причину. Пам'ятайте, що несподівано може виникнути напруга.

#### **4.4 Вимоги безпеки після закінчення роботи**

4.4.1. При завершенні роботи користувач ПК мусить провести закриття всіх активних задач чи програм. Необхідно впевнитися в тому, що в дисководах відсутній компакт диск.

4.4.2 Вимкнути принтер, інші периферійні пристрої, вимкнути монітор і системний блок. За умови підключення комп'ютеру до мережі через стабілізатор необхідно його вимкнути. Штепсельні вилки витягнути з розеток. Накрити клавіатуру спеціальною кришкою для подальшого запобігання попадання і накопичення органічного пилу.

4.4.3 Навести лад на робочому місці. Оригінали та інші документи прибрати з робочого місця подалі, в ящик стола.

4.4.4 Вимити руки теплою водою з милом досить ретельно.

4.4.5 Вимкнути освітлення ,а також загальне електроживлення.

4.4.6. Якщо буде виникнення недоліків у роботі ПК доповісти безпосередньому керівнику робіт або відповідальному за справний стан апаратури.

#### **4.5 Вимоги безпеки в аварійних ситуаціях**

4.5.1 За умови різкого припинення подачі електроенергії вимкнути комп'ютер згідно такої послідовності: периферійні пристрої, монітор, системний блок, стабілізатор напруги, витягнути штепсельні вилки з розеток.

4.5.2 У разі виникнення небезпечної ситуації ( дим, запах гару, ознаки горіння дія електричного струму) негайно відключіть ПК від електромережі, повідомте самостійно чи через іншого працівника про відповідальну особу за справний стан приладу .Досить важливо не залишати ПК без постійного нагляду.

4.5.3 У випадку виникнення пожежі негайно приступіть до гасіння пожежі первинними засобами для пожежогасіння (порошковим вогнегасником ВП–2), якщо виникла необхідність повідомте пожежну частину за номером телефону 101;

4.5.4 За умови ураження електричним струмом необхідно надати потерпілому першу медичну допомогу, викликати швидку допомогу за номером телефону 103.

#### **4.6 Охорона праці на підприємстві**

На даний момент розвитку нашої країни досить актуальним питанням є охорона праці на підприємствах.

Організація охорони праці на підприємстві згідно нормативно-правових актів являється головним заходом попередження та запобігання виробничих травм й професійних захворювань.

Головним актом закон, який відповідає за організацію охорони праці на підприємстві являється Закон України «Про охорону праці» від 14 жовтня 1992 року № 2694-ХІІ (надалі – Закон). Поширення дії цього Закону відбувається на всіх

юридичних і фізичних осіб, які згідно з законодавством використовують найману працю, а також на всіх працюючих осіб.

Кожен трудовий договір передбачає зобов'язання роботодавця щодо надання безпечних умов праці найманим працівникам.

Законодавство України зобов'язує всіх роботодавців надати нешкідливі і безпечні умови праці. Надання коштів на охорону праці на підприємстві відповідно до статті 19 Закону повинні становити не менше 0,5% від фонду оплати праці за попередній рік, а за недотримання законодавства про охорону праці підприємство може отримати штрафні санкції, які можуть призвести до закриття підприємства.

Для того, щоб забезпечити гідні умови праці згідно Закону роботодавець повинен:

1. Заснувати службу охорони праці.

Відповідно до статті 15 Закону така служба повинна обов'язково бути наявною на підприємстві, де працює 50 і більше осіб відповідно до Типового положення про службу охорони праці, затвердженого наказом Держкомітету з нагляду за охороною праці від 15.11.2004 № 255. Згідно з цим документом досить важливо впровадити Положення про службу охорони праці обраного підприємства, описати структуру такої служби, її чисельність, провідні завдання та права її працівників. Крім того, повинні бути затверджені посадові інструкції посадових осіб служби, що визначають їх обов'язки, права та відповідальність за виконання покладених на них функцій.

На підприємствах, де кількість працюючих становить менше 50 осіб функції служби охорони праці можуть бути виконаними у порядку суміщення працівника, який має попередню підготовку. На підприємствах із кількістю працюючих осіб, яка становить менше 20 осіб для виконання завдань служби охорони праці можуть на умовах договору залучатися фахівці з інших підприємств, виробничий стаж яких становить не менше 3 років і пройшли курси з охорони праці.

2. Розробити і впровадити на підприємстві положення, інструкції та спеціальні акти щодо охорони праці.



Обов'язок роботодавця відповідно до розробки та впровадження документації, яка встановлює правила забезпечення робіт і поведінки працівників на території підприємства, у робочих приміщеннях, на будівельному майданчику і робочому місці, який передбачається статтею 13 Закону. Інструкції та інші документи з охорони праці впроваджуються на основі чинних законодавчих актів із охорони праці, стандартних інструкцій та технологічних документів підприємства з урахуванням його виду діяльності й конкретних особливостей.

### 3. Організація надання інструктажів з питань охорони праці.

Для початку роботи нового працівника роботодавець згідно зі статтею 29 КЗпП змушений надати інформацію під розпис нового працівника про умови праці, які є наявними на його робочому місці, враховуючи всі можливі небезпечні чи шкідливі фактори виробництва, які ще не усунуто, та про можливі наслідки їх впливу на здоров'я працівника, а також про можливі пільги та компенсації за роботу в таких умовах.

Крім того, при прийнятті на роботу всі працівники повинні за рахунок роботодавця прослухати вступний інструктаж, навчання, перевірку знань із теорії, первинний інструктаж на робочому місці, стажування і отримання навичок для безпечної роботи на підприємстві. Тільки за умов успішного проходження цих етапів нові працівники можуть бути допущені до самостійної роботи. Вступний інструктаж проводиться спеціалістом з охорони праці, а первинний - саме керівником працівника. В подальшому з працівникам необхідно проводити повторні інструктажі (раз на три місяці або раз на півріччя), позапланові (за умови змін правил охорони праці, змін в обладнанні або при порушенні працівником правил охорони праці) та цільові інструктажі (зокрема, при одноразових роботах, які не пов'язані зі спеціальністю). Інформація про проведення інструктажів необхідно вносити до відповідних журналів з підписом як того, кого інструктували, так і того, хто інструктував.

### 4. Забезпечення навчання і перевірки знань з питань охорони праці.

Відповідно до статті 18 Закону працівники, які є зайнятими на роботах з підвищеною небезпекою або там, де є потреба у професійному доборі, мають

необхідість пройти спеціальне навчання і перевірку знань відповідних нормативно-правових актів з охорони праці. Саме таке навчання з питань охорони праці може бути проведено як на підприємстві, так і відповідним навчальним центром.

Склад комісії може включати осіб, які пройшли підготовку та атестацію щодо володіння знаннями з нормативно-правових актів охорони праці.

Працівники на момент прийняття на роботу та в процесі роботи, а також учні, курсанти, слухачі та студенти під час професійного і трудового навчання проходять на підприємстві за рахунок роботодавця інструктажі, навчання та перевірку знань з питань охорони праці, надання домедичної допомоги потерпілим від нещасних випадків, а також правил поведінки у разі виникнення аварії.

Детальні умови стосовно порядку проходження навчання та атестації знань відповідно питанням з охорони праці, який внесений до наказу Державного комітету України по нагляду за охороною праці від 26.01.2005 р. № 15. Цей документ також передбачає те, що на підприємстві повинні бути запроваджені спеціальні положення стосовно навчання з питань охорони праці, а також розроблені графіки проведення навчання та атестації знань з питань охорони праці, з якими всі працюючі особи мусять бути ознайомлені.

#### 5. Запровадження проходження медичних оглядів.

Відповідно до статті 169 КЗпП роботодавець зобов'язується за свої кошти організувати проведення попереднього (при прийнятті на роботу) та періодичних (протягом проведення трудової діяльності) медоглядів працівників, які є зайнятими на важких роботах, роботах, які можуть спричинити шкідливий чи небезпечний вплив на здоров'я особи, яка працює або таких, де є потреба у професійному доборі. Також необхідно надавати можливість проходження щорічного медогляду особам віком до 21 року.

Перелік професій, підприємств та організацій, осіб, які працюють на них і підлягають обов'язковим професійним медоглядам і порядок проведення затверджені постановою КМУ від 23.05.2001 № 559. Тривалість проведення таких медоглядів встановлюються Міністерством охорони здоров'я України. Графіки їх проведення, місцеположення проведення та перелік докторів, які проводять

обстеження, затверджується головними лікарями закладів охорони здоров'я, де буде проведено медогляд. Результати професійного медогляду працівників у вигляді висновку про їх можливу працездатість заносяться до медичних книжок, які зберігаються у роботодавця.

6. Надати працівникам засоби індивідуального захисту, мило, молоко, солоняною водою та інше.

В умовах шкідливої або небезпечної праці, а також на роботах, які є пов'язаними із забрудненням або умовами температур, які є визначені, як несприятливі, працівникам згідно зі статтею 164 КЗпП необхідно безоплатно видати спеціальну уніформу, взуття та інші засоби індивідуального захисту (далі – ЗІЗ). Норми безкоштовної видачі ЗІЗ, які є затвердженими окремими наказами профільних міністерств або інших державних органів для визначених видів виробництва. Видавати замість ЗІЗ матеріали для їх виготовлення або коштів для їх придбання суворо заборонено. За умови придбання працівником ЗІЗ за свій рахунок через порушення тривалості їх безкоштовної видачі, роботодавцю необхідно компенсувати затрачену суму.

Окрім цього, на роботах, які є пов'язані із забрудненням, працівники повинні отримувати мило на домашнє використання (не менше, ніж 400 грам на місяць) не враховуючи мило, яке розташовується на підприємстві біля умивальників. В умовах роботи, які можуть викликати вплив на шкіру шкідливо діючих речовин, необхідно забезпечити працівників дезинфікуючими і знезаражувальними засобами. На роботах, де є шкідливі умови праці працівники повинні бути забезпечені молоком (по 0,5 літра за зміну) або інші рівноцінні харчові продукти, а на роботах з досить шкідливими умовами праці необхідно забезпечити лікувально-профілактичне харчування. Роботодавець мусить надавати на безоплатній основі працівникам гарячих цехів і виробничих ділянок газовану солоняною воду.

7. Атестація місць для роботи.

На виробничих підприємствах, де є достатня кількість потенційних джерел шкідливих і небезпечних виробничих факторів, які негативно впливають на стан здоров'я осіб, які працюють, повинна проводитись атестація робочих місць

відповідно до умов праці. Проведення атестації забезпечується атестаційною комісією, відповідний склад і повноваження членів комісії визначаються наказом по підприємству в терміни, які є передбаченими умовами колективного договору, але не менше, ніж один раз на 5 років. Терміни і порядок проведення такої атестації передбачений постановою КМУ від 01.08.1992 № 442. Результати атестації заносяться в картку умов праці.

8. Створити і забезпечити функціонування обліку нещасних випадків.

Відповідно до статті 22 Закону «Про охорону праці» роботодавцю необхідно організувати розслідування та вести облік нещасних випадків, професійних захворювань і аварій у порядку, встановленому постановою КМУ від 30.11.2011 № 1232. Згідно з результатами такого розслідування роботодавець повинен складати акт за формою Н-5 (якщо нещасний випадок не є пов'язаним з виробництвом) або Н-1 (якщо він отримав підтвердження про зв'язок з виробництвом). Необхідно видати один з примірників потерпілому або особі, яка є зацікавленою не пізніше трьох днів з моменту закінчення розслідування.

Окрім описаного вище, роботодавець має ще низку умов, які є пов'язаними з охороною праці. Певна частина з них є декларативною, інші частини вимагають обов'язкового дотримання.

## ВИСНОВКИ

Поява високоентропійних сплавів, які складаються з безлічі основних елементів, на відміну від звичайних сплавів з одним і рідко двома елементами основи, вказують на парадигматичний зсув у конструкції сучасних сплавів. Механічні/фізичні/хімічні властивості високоентропійних сплавів, як сплавів, які досліджуються не так багато часу ще не досліджені в повному обсязі. Однак уже виникли фундаментальні проблеми, одна з яких - формування різних фаз у високоентропійних сплавах.

У роботі було використано дослідження критеріїв 126 п'яти компонентних сполук з еквіатомним вмістом складу з ОЦК, ГЦК або ОЦК + ГЦК структурою. Для розрахунку були обрані рефракторні метали такі, як Ti, V, Cr, Nb, Mo, Ta, Mn, Re, W. Найбільш прогнозовані однофазні високоентропійні сплави TiVCrMoRe, VMoMnReW, TiVMoTaW, VCrMoReW. З використанням створеного алгоритму машинного навчання для набору цих сплавів були змодельовані значення досліджуваних параметрів. В результаті отриманих кількісних характеристик були побудовані графіки залежностей параметрів високоентропійних сплавів від середнього ковалентного радіусу, концентрації валентних електронів, а також побудовані графіки залежності прогнозування високоентропійності сплавів від середніх значень електронегативності, ковалентного радіусу, середнього значення атомної маси, концентрації валентних електронів.

Це дослідження показало, при яких значеннях параметрів високоентропійних сплавів можливо утворення однофазних структур, що є однією з концепцій дослідження високоентропійних сплавів. Дані, які були отримані завдяки алгоритму машинного навчання тісно переплітаються з попередніми дослідженнями вчених.

Враховуючи вище сказане, можливо зробити висновок, що ці властивості є перспективними для нових відкриттів та винаходів у майбутньому, що в підсумку може призвести до нових застосувань.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Solid- Solution Phase Formation Rules for Multi- component Alloys / Z. Yong, J. Z. Yun, L. Junpin, L. C. Guo. // *Advanced Engineering Materials*. – 2008. – №10. – С. 534 – 538.
2. Creation and Mössbauer studies of high-entropy physical vapor deposition by cathode arc evaporation (PVD CAE) coating AlFeCoNiCuCr / V. M. Nadutov, A. V. Proshak, S. Makarenko, V. Y. Panarin. // *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*. – 2016. – №47. – С. 272–277.
3. The Influence of Synthesis Conditions on the Phase Composition, Structure, and Properties of the High-Entropy Ti–Cr–Fe–Ni–Cu Alloy / M. V. Marych, G. A. Bagliuk, A. A. Mamonova, A. N. Gripachevskii. // *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. – 2019. – №57. – С. 533–541.
4. The Role of Carbon in Grain Refinement of Cast CrFeCoNi High-Entropy Alloys / [L. Xinwang, W. Xiaoxiang, L. Liu та ін.]. // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2018. – №49.
5. Kumar N. Preparation of nanocrystalline high-entropy alloys via cryomilling of cast ingots / N. Kumar, S. T. Chandra, B. Krishanu. // *Journal of Materials Science*. – 2018. – №53.
6. Influence of Annealing on Microstructure and Mechanical Properties of Refractory CoCrMoNbTi<sub>0.4</sub> High-Entropy Alloy / M. Zhang's, X. Zhou's, W. Zhu's, J. Li. // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2018.
7. Xing Q. Amorphous phase formation rules in high-entropy alloys / Q. Xing, Y. Zhang. // *Chinese Physics B*. – 2017. – №26.
7. Short-Range Order in High Entropy Alloys: Theoretical Formulation and Application to Mo-Nb-Ta-V-W System / A. Ferná'ndez-Caballero, J. S. Wro'bel, P. M. Mummery, D. Nguyen-Manh. // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. – 2017. – №38.
8. High Strain Rate Response of Al<sub>0.7</sub>CoCrFeNi High Entropy Alloy: Dynamic Strength Over 2 GPa from Thermomechanical Processing and Hierarchical Microstructure /

S.Gangireddy, B. Gwalani, R. Banerjee, R. S. Mishra. // Journal of Dynamic Behavior of Materials. – 2019. – №5.

9. Effect of Ti additions on mechanical properties of NbMoTaW and VNbMoTaW refractory high entropy alloys / [Z. D. Han, N. Chen, S. F. Zhao та ін.]. // Intermetallics. – 2017. – №84. – С. 153–157.

10. Experimental investigations into grinding characteristics of high entropy alloys (HEAs) using micro grinding / [L. Yin, G. Ya-dong, Z. Huan та ін.]. // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. – 2018.

11. High Entropy Alloys: Prospective Materials for Tribo-Corrosion Applications / [R. B. Nair, H. S. Arora, A. Ayyagari та ін.]. // Advanced Engineering Materials. – 2018.

12. Indentation Strain Rate Sensitivity of CoCrFeNiAl<sub>0.3</sub> High- Entropy Alloy / [J. Qiu, G. Xiao, T. Jin та ін.]. // Advanced Engineering Materials. – 2018. – №21.

13. Fracture Along Deformation Twin Boundary in Small- Volume Fe<sub>40</sub>Mn<sub>40</sub>Co<sub>10</sub>Cr<sub>10</sub> High Entropy Alloy / [Y. Wang, P. Yang, X. Sun та ін.]. // Advanced Engineering Materials. – 2019.

14. A Combinatorial Approach for Assessing the Magnetic Properties of High Entropy Alloys: Role of Cr in AlCo<sub>x</sub>Cr<sub>1-x</sub>FeNi\*\* / [T. Borkar, V. Chaudhary, B. Gwalani та ін.]. // Advanced Engineering Materials. – 2017.

15. High-Entropy Alloy (HEA)-Coated Nanolattice Structures and Their Mechanical Properties / [L. Gao, J. Song, Z. Jiao та ін.]. // Advanced Engineering Materials. – 2017.

16. Chang C. Oxidation Behavior between 700 and 1300 C of Refractory TiZrNbHfTa High-Entropy Alloys Containing Aluminum / C. Chang, M. Titus, J. Yeh. // Advanced Engineering Materials. – 2018. – №20.

17. Room-Temperature Mechanical Properties of V<sub>20</sub>Nb<sub>20</sub>Mo<sub>20</sub>Ta<sub>20</sub>W<sub>20</sub> High-Entropy Alloy / [S. Wu, X. Wang, J. Lu та ін.]. // Advanced Engineering Materials. – 2018. – №20.

18. A Review on High Entropy Alloys Coatings: Fabrication Processes and Property Assessment / J.Li, Y. Huang, X. Meng, Y. Xie. // Advanced Engineering Materials. – 2019.

19. Zhang B. A thermodynamic study of corrosion behaviors for CoCrFeNi-based high-entropy alloys / B. Zhang, Y. Zhang, S. Guo. // *Journal of Materials Science*. – 2018. – №53.
20. Rahul M. Design of a Seven-Component Eutectic High-Entropy Alloy / M. Rahul, G. Phanikumar. // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2019. – №50. – C. 2594–2598.
21. Microstructure and Mechanical Behavior of High-Entropy Alloys / P. Jablonski, J. Licavoli, M. Gao, J. Hawn. // *Journal of Materials Engineering and Performance*. – 2015. – №24. – C. 3685–3698.
22. The Phase Competition and Stability of High-Entropy Alloys / [W. LIU, Y. WU, J. HE та ін.]. // 2014. – №66. – C. 1973–1983.
23. Miracle D. High-Entropy Alloys: A Current Evaluation of Founding Ideas and Core Effects and Exploring “Nonlinear Alloys / Daniel B. Miracle. // *JOM*. – 2017. – №69. – C. 2130–2136.
24. Yeh J. Recent progress in high-entropy alloys / Jien-We Yeh. // *European Journal of Control*. – 2006. – №31. – C. 633–648.
25. Tsai Y. K. Sluggish diffusion in Co–Cr–Fe–Mn–Ni high-entropy alloys” / Y. K. Tsai, H. T. Tsai, V. J. Yeh. // *Acta Materialia*. – 2013. – №61. – C. 4887–4897.
26. Effect of the Rare Earth Element Yttrium on the Structure and Properties of Boron-Containing High-Entropy Alloy / [G. Li, M. Liu, H. Wang та ін.]. // *JOM*. – 2020.
27. Deep Drawing Behavior of CoCrFeMnNi High-Entropy Alloys / [J. Bae, J. Moon, M. Jang та ін.]. // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2017. – №48. – C. 4111–4120.
28. Beke D. L. On the diffusion in High-entropy alloys / D. L. Beke, G. Erdélyi. // *Materials Letters*. – 2015. – №164.
29. Melting temperature of CoCrFeNiMn high-entropy alloys / M. Gutierrez, G. Rodriguez, G. Bozzolo, H. Mosca. // *Computational Materials Science*. – 2018. – C. 69–75.
30. Rizzardi Q. Fast Slip Velocity in a High-Entropy Alloy / Q. Rizzardi, G. Sparks, R. Maaß. // *JOM*. – 2018. – №70. – C. 1088–1093.



31. Zhang W. Science and technology in high-entropy alloys / W. Zhang, P. Liaw, Y. Zhang. // *Science China Materials*. – 2018. – №61.
32. Butler T. Oxidation behavior of arc melted AlCoCrFeNi multi-component high-entropy alloys / T. Butler, M. Weaver. // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2016. – №674.
33. Liang J. Effect of heat treatment on the phase evolution and mechanical properties of atomized AlCoCrFeNi high-entropy alloy powders / J. Liang, K. Cheng, S. Chen. // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2019. – №803. – C. 484–490.
34. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science / J.Schmidt, M. Marques, S. Botti, M. Marques. // *npj Computational Materials*. – 2019. – №5.
35. Materials discovery and design using machine learning / Y.Liu, T. Zhao, W. Ju, S. Shi. // *Journal of Materiomics*. – 2017. – №3. – C. 159–177.
36. Machine learning in materials science / [J. Wei, X. Chu, X. Sun та ін.]. // *InfoMat*. – 2019. – №1. – C. 338–358.