

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Факультет електроніки та інформаційних технологій
Кафедра наноелектроніки та модифікації поверхні

Кваліфікаційна робота бакалавра
зі спеціальності 153 – «Мікро- та наносистемна техніка»

на тему:

«Використання машинного навчання для визначення температури Дебая
та теплоємності високоентропійних сплавів»

Студент групи ФЕ-71

Загорулько А.А.

Науковий керівник,
канд. фіз.-мат. наук,

Рогоз В.М.

Суми – 2021

Реферат

Мета роботи – дослідити методи моделювання властивостей сплавів за допомогою машинного навчання.

В даній роботі ми розглянемо можливості використання базових принципів та інтеграції машинного навчання для отримання теплопровідності та порівняння цих властивостей с іншими високоентропійними сплавами.

В роботі було проведено наукове дослідження методів аналізування та прогнозування параметрів високоентропійних сплавів використовуючи принципи машинного навчання. Для виконання завдання були розглянуті поняття машинного навчання, також який саме алгоритм машинного навчання буде використаний в розрахунковій роботі.

У результаті порівняння даних моделювання та експериментальних даних були знайдені близькі значення та найкращі значення для теплопровідності та теплоємності, щільності. Також були знайдені найкращі значення відносно теплопровідності.

Робота викладена на 29-и сторінках, зокрема містить 2 формули, 12 рисунків, 2 таблиці та список використаної літератури із 20 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ВИСОКОЕНТРОПІЙНІ СПЛАВИ, ТЕПЛОЄМНІСТЬ, МАШИННЕ НАВЧАННЯ, ЛІНІЙНА РЕГРЕСІЯ, ТЕМПЕРАТУРА ДЕБАЯ, ГРАДІЄНТ БУТІНГА.

Зміст

Вступ	4
1. Літературний огляд.....	5
1.1 Вискоентропійні сплави та їх властивості.....	5
1.2 Методи отримання високоентропійних сплавів.....	6
1.3 Основні поняття про температуру Дебая та теплоємність.....	8
1.4 Машинне навчання	9
2. Методи дослідження	14
2.1 Засоби розробки	14
2.2 Принцип роботи алгоритмів штучного інтелекту.....	15
2.2.1 Алгоритм лінійної регресії.....	15
2.2.2 Градієнт бустінга	16
3. Розрахункова частина.....	20
3.1 Хід роботи	20
3.2 Результати роботи.....	22
Висновок	26
Список використаної літератури	27

Вступ

В дипломній роботі ми будемо розглядати високоентропійні сплави, лінійну регресію, градієнт бустину.

Сплави з високою ентропією - це металеві сплави, що складаються з безліч головних елементів в еквімолярному або майже еквімолярному відношенні, містять, як правило, від 4 до 9, а іноді до 20 елементів [3]. У ВЕСи надзвичайно високий хімічний (замісний) розлад створює високу ентропію змішування, яка здатна стабілізувати неупорядковані фази твердого розчину за допомогою простих кристалічних структур. Вони мають високу твердість, зносостійкість, як за нормальних умов так і за підвищених температур, стійкість до окислення, можуть мати корозійну стійкість навіть вищу, ніж у нержавіючих сталей, а також радіаційну стійкість. Високоентропійні сплави застосовуються в умовах ударних, динамічних навантажень, тертя, підвищених температур. Сплави можуть виготовлюватися як об'ємні матеріали, так і для застосування у різних галузях промисловості.

Лінійна регресія - це підхід до моделювання зв'язку між скалярною відповіддю та однією або кількома пояснювальними змінними.

Також в даній роботі ми розглянемо основні поняття про температуру Дебая та теплоємність. Як це не дивно, але поняття температури Дебая використовується в багатьох задачах фізики твердого тіла, в тому навіть не пов'язаних з теплоємністю. В даний час інтенсивно досліджуються структурні характеристики органічних сполук. У той же час термодинамічні властивості органічних речовин вивчені недостатньо.

1. Літературний огляд

1.1 Високоентропійні сплави та їх властивості

Високоентропійні сплави (ВЕСи) – сплави, що містять у своєму складі 5 і більше металевих елементів (зазвичай від п'яти до тринадцяти) в еквімолярних або майже еквімолярних пропорціях.

Високоентропійні сплави – це принципово новий клас матеріалів [1]. Особливістю сплавів є те, що вони мають високі значення ентропії змішування в вихідному і рідкому стані. Вважається що спочатку, висока ентропія змішування може значно зменшити вільну енергію Гіббса. Пригнічує утворення інтерметалідні фази, і тим сприяє формуванню однофазних стабільних твердих розчинів заміщення з відносно простою кристалічною структурою і гарною комбінацією властивостей. Однак більш пізні дослідження різних систем сплавів показали, що в багатьох випадках формуються впорядковані тверді розчини або інтерметаллідні фази [2].

Утворення подібних структур відбувається за рахунок значних спотворень ґратки, викликаних різницею атомних радіусів елементів заміщення. Вони зменшують швидкість дифузійних процесів, тим самим знижуючи темпи зростання кристалітів [3].

Також ВЕСи володіють високою питомою міцністю та модулем Юнга у порівнянні з іншими сплавами які можуть змінюватись в широкому діапазоні.

В ході дослідження ВЕСів було з'ясовано, що вони термостабільні і мають високі механічні властивості, такі як висока твердість, зносостійкість, міцність, корозійна стійкість, пластичність при низьких температурах і надпластичні властивості [3].

Властивості ВЕСів значною мірою визначаються впливом процесів, які не завжди притаманні традиційним багатоелементним сплавам, а саме [4]:

- 1) Вплив ентропії змішування
- 2) Вплив викривлення кристалічної ґратки сформованого твердого розчину;
- 3) Вплив уповільненої дифузії;

4) Ефект перемішування.

Також до особливостей сплавів належить наявність так званого ефекту перемішування. Суть його досить проста. Деякі випадки, у ВЕСах формуються окрім основної фази інші. Як упорядковані, так і неупорядковані – фази. Цей факт трохи не сходиться з висловленнями вище, але слід урахувати той факт, що на формування декількох фаз впливають особливі умови одержання. Але, у незалежності від цього, властивості ВЕСів залежать як від внеску окремих елементів, так і сформованих фаз. У випадку високоентропійних сплавів можна з великою точністю передбачити лише стан речовини [5].

1.2 Методи отримання високоентропійних сплавів

На сьогодні вчені використовують декілька методів отримання високоентропійних сплавів.

Гартування розплаву. Для отримання високоентропійного сплаву використовується метод лиття багатоконпонентних виливок. З вмістом 5–10 елементів, в тому числі і тугоплавких, при чому кількість кожного елементу складає від 5 до 35 ат. %[8].

Для виготовлення сплаву металеві заготовки плавлять в атмосфері очищеного аргону електродуговим способом з невитратним вольфрамовим електродом в мідному водоохолоджуваному стакані, що має форму напівсфери. Отримані злитки переплавляють не менше 5 разів для гомогенізації складу, після чого виливають у мідну виливницю, що охолоджується водою. При цьому досягаються великі швидкості охолодження до 1000 (°/с) або безпосередньо на підложку – 3000 (°/с). Отримання сплаву, який представляє собою однофазний твердий розчин всіх розміщених в ньому елементів залежить від декількох факторів, у першу чергу, від якісного та кількісного складу і швидкості охолодження [8].

Осадження плівок. Багатокомпонентні покриття наносять на підкладку методом вакуумно-конденсаційного осадження. В процесі осадження покриття формується з потоку частинок, що знаходяться в атомарному, молекулярному або іонізованому стані. Потік частинок отримують випаровуванням матеріалу за рахунок впливу на нього різними енергетичними джерелами. Розрізняють розпилення матеріалу, що наноситься шляхом термічного випаровування, іонного розпилення твердого матеріалу. Вакуумно–конденсаційне осадження проводять в жорстких герметичних камерах. Буде забезпечуватися необхідна довжина вільного пробігу напилюваних частинок.

Електроліз. Отримувати багатокомпонентні матеріали можна шляхом осадження металів з кількох окремих електролітів. При умовах точного контролю за перемішуванням електроліту і електричних параметрів (зокрема, напруги). Сам процес електролізу, добре вивчений та науково обґрунтований. [9].

Механічне легування порошкових матеріалів. Механічне легування є унікальним процесом синтезу сплавів у вигляді порошку. Теоретична основа процесу механічного легування була запропонована в 70–х роках 20-го ст. Цей процес полягає у змішуванні елементів або основних складових сплавів (лігатур) у формі порошку, при досягненні необхідної дисперсної фаз із використанням атриторів або планетарних млинів з відносно високим вмістом розмельних тіл [10].

В основі механічного легування лежить явище, яке представляє собою холодне міжчастинкове зварювання, яке відбувається, коли розмольні тіла зіштовхуються між собою деформуючи частинки порошку які знаходяться між ними [7].

Механічне легування дозволяє отримати тверді розчини, навіть, у металах, які не розчиняються один в одному [8]. В ході механічного легування змінюється мікротвердість частинки легованого сплаву

1.3 Основні поняття про температуру Дебая та теплоємність

Температура Дебая — характеристика твердих тіл, яка має розмірність температури й визначає характер температурної залежності теплоємності твердого тіла. Встановлена Петером Дебаєм в межах розробленої ним моделі теплопровідності твердих тіл [11].

Дебай, зберіг основну ідею Ейнштейна, удосконаливши теорію теплоємності. У моделі Дебая кристалічна решітка розглядається як пов'язана система взаємодіючих атомів. Коливання такої системи буде результатом накладання багатьох гармонійних коливань з різними частотами.

Закон теплоємності Дебая використовують для оціночних розрахунків теплоємності, теплопровідності, електропровідності речовин, розсіювання випромінювань речовинами при низьких температурах порядку 0 - 100 К. Для проведення таких розрахунків для кожної речовини підібрана в порівнянні з експериментальними даними своя температура Дебая, вона зазвичай наводиться в довідниках.

Закон теплоємності Дебая також використовують для технічних розрахунків в криогенній техніці (пристроїв для зберігання і транспортування зріджених газів, пристроїв для охолодження до низьких температур). Із закону теплоємності Дебая слід, що при низьких температурах теплоємність мала. Тому малі кількості тепла, повідомлені системі, призводять до великих змін температури входять в систему тел. Через це в системі виникають великі температурні напруги, які треба враховувати при проектуванні технічних систем[11].

У квантовій теорії енергія звукових коливань $h\nu$ розглядають як особливі частинки фонони. Число можливих частот коливань нескінченно велике. А число атомів в твердому стані дуже велике хоча воно приблизно 10^{22} в 1 см^3 . Тому нам необхідно зробити як Дебай, що в твердому тілі спектр коливань обмежений максимальною частотою ν_m . З такої теорії буде слідувати, що починаючи з певної температури θ . Таку температуру називають

температурою Дебая, теплоємність починає швидко зменшуватися зі зниженням температури.

Розглянемо що таке теплоємність – це кількість теплоти що поглинається тілом в процесі нагрівання на 1 кельвін. Більш точно поняття теплоємності буде звучати так- фізична величина, яка визначається як відношення кількості теплоти, що поглинається/ виділяється термодинамічної системою при нескінченно малій зміні її температури, до величини цієї змінної[12]

Якщо теплоємність буде віднесена до кількості одиниці речовини то її називають питомою.

Експериментальне дослідження теплоємності речовини дозволяє не тільки отримувати надійні данні, а й розраховувати на їх підставі інші термодинамічні властивості речовин.

Закон теплоємності Дебая застосовується, для оцінки розрахунків теплоємності, теплопровідності, електропровідності речовин. Щоб провести такі розрахунки для кожної речовини підібрана в порівнянні з експериментальними даними своя температура Дебая, вона буде наводитися в довідниках. Також закон теплоємності Дебая використовують для технічних розрахунків в криогенній технік. З законів теплоємності Дебая слід зазначити що при низьких температурах теплоємність буде малою, тому мала кількість теплоти. Через це в системі буде виникати великі температурні напруги, які потрібно враховувати при проектуванні технічних систем.

1.4 Машинне навчання

Машинним навчанням називають галузь комп'ютерних наук, яка буде вивчати методи навчання комп'ютеризованих систем на підставі даних без програмування їх поведінки[13].

Методи машинного навчання поділяють на дві основні категорії. Навчання з учителем та навчання без учителя. Методи навчання з учителем поділяють вхідні дані на набір наперед заданих класів. Для навчання такого класифікатора потрібна навчальна вибірка, яка містить марковані зразки різних класів. Методи навчання без учителя не потребують навчальних даних. Проте вони не ставлять у відповідність вхідним даним певний клас, а лише вивчають закономірності у вхідних даних та поділяють вхідні дані на схожі між собою групи [13]. Оскільки завданням роботи є аналіз методів класифікації, то надалі розглядатимемо лише методи навчання з учителя.[13]

Багато термодинамічних розрахунків та інженерних застосувань вимагають апріорного температурного заряду матеріалу. Перші розрахунки теплових потужностей можуть стояти на місці експериментальної інформації, але такі розрахунки будуть дорогими. Але створили високоточного контролюючого інструмента на основі машинного навчання. Для прогнозування теплової потужності, що залежить від температури, метод машинного навчання буде передбачити теплоємність тисяч сполук за одну декілька секунд, пропонуючи легкі впровадження в інтегровані процеси обчислювальних матеріалів. Метод буде вимагати лише введення формул при розрахунку теплової потужності і може бути повністю автоматизованою.

Машинне навчання саме по собі не вимагає знання основних фізичних принципів при прогнозуванні теплової потужності. Процес перетворення похідних від елементів у передбачення обробляється алгоритмом із застосуванням суто статистичних методів. Що стосується теплоємності, то походження та механізм роботи добре відомий протягом багатьох років. Ми очікуємо, що найважливіші характеристики узгоджуватимуться з фізичними механізмами теплоємності. Насправді, три найважливіші особливості при прогнозуванні теплоємності при підвищених температурах, не враховуючи розрахунки Неймана-Коппа, ці особливості - це всі властивості, як правило, пов'язані зі зв'язком молекули. Традиційне розуміння теплоємності, яка використовує частоту коливань у твердому тілі, добре стосується цього

спостереження, оскільки сила та тип зв'язку впливатимуть на частоти коливань. Таким чином, спостережувані особливості підсилюють зрозумілий в даний час фізичний механізм теплоємності. При кімнатній температурі машинне навчання працює нарівні з Нейманом-Коппом і має порівнянні показники з методом розрахунку теплоємністю до 1000 К, як видно на рисунку 2.1. Понад 1000, похибка розрахунку теплоємності починає зростати через обмеження з використанням ряду потужності. Усі моделі мають подібну температурну поведінку, причому випадковий ліс демонструє найменшу похибку. Метод Неймана-Коппа для прогнозування теплоємності традиційно відмовляється від підвищених значень температури, змушуючи деякі покладатися на громіздкий метод внеску катіону / аніону або розрахунки DFT. Ці процеси вимагають багато часу, і в деяких випадках самі значення оксиду та катіону / аніону недостатньо відомі. Результати цієї роботи свідчать про те, що передбачення машинного навчання можуть не тільки замінити розрахунки Неймана-Коппа як високопродуктивний метод при кімнатній температурі. Також можуть бути використані при підвищених температурах з прийнятною точністю прогнозування. Машинне навчання пропонує процентну похибку при 7,96% при кімнатній температурі та 7,27% при підвищеній температурі. Вони перевершують розрахунки Неймана-Коппа на 13,69%, а похибки розрахунку теплоємністю - 17,30%.

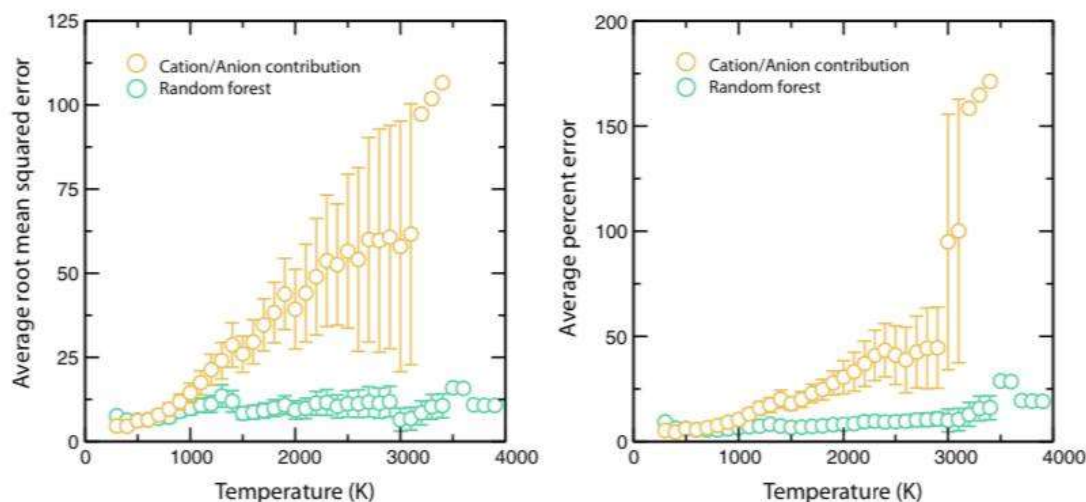


Рисунок 1.1 Порівняння продуктивності у порівнянні з температурою. Теплоємність була згрупована. Збільшення на 100 градусів і 100 оцінок продуктивності в середньому. 95% впевненості показані на інтервалі

Оскільки ми просимо моделі прогнозувати теплоємність при температурах, що перевищують температуру навколишнього середовища, ми можемо спостерігати початок помилок у різних підходах. Розроблені моделі чітко працюють так само, як і Неймана-Коппа при кімнатній температурі, і демонструють кращу точність з меншими зусиллями в порівнянні з методами внесення катіонів / аніонів при високих температурах, але все ще можна зробити вдосконалення. Існує ряд додаткових прийомів, які можуть додатково вдосконалити цей алгоритм машинного навчання. Мабуть, найважливішою зміною є розширення даних у навчальному наборі. Ця модель напроцуд точна, незважаючи на те, що вона навчена лише 263 записам формул. Можуть бути додані сотні додаткових записів, якщо дослідники розглянуть термохімічні тексти, такі як Термохімічні дані Барина про чисті речовини [9]. Крім даних, функції також можна розширити для підвищення продуктивності. Наприклад, нові функції можуть бути додані за допомогою систематичного підходу для отримання катіонного / аніонного внеску та розрахунків змішаних оксидів.

Елементарні риси можуть бути вдосконалені за допомогою простого підходу, що використовується в цій роботі, щоб охопити більше фізичних взаємодій.

2. Методи дослідження

2.1 Робота з програмою Colaboratory та розгляд її компонентів

Вибір програмування для створення алгоритму обирався за такими критеріями розрахунку, а саме простоті кодування та можливості розрахунку окремих існуючих параметрів, обробка великих масивів даних.

Головні можливості для роботи з програмою повинні бути наступні чинники:

1. Можливість виконання принципів машинного навчання
2. Знаходження помилок та їх перевірка
3. Виведення результатів у вигляді файлів Excel
4. Зчитування вхідних даних у вигляді файлу для подальшої обробки

Colaboratory, або скорочено Colab – це продукт компанії Google Research. Colab дозволяє лютому писати та виконувати виробничий код Python через браузер і особливо добре підходить для машинного навчання, аналізу даних та освіти[14].

Також слід зазначити допоміжні модулі, які використовуються для розрахунку потрібних параметрів, а саме Python.

Python - це інтерпретований об'єктно-орієнтований мовний програмування високого рівня з динамічною семантикою. Його високоуровневі вбудовані структури даних у співпраці з динамічною типовою та динамічною прив'язкою роблять його дуже привабливим для побудови розроблених додатків. Також для використання у вашому мовному сценарії або зв'язуючій мові для з'єднання існуючих компонентів. Простий і легкий в освоєнні синтаксису Python підкреслює удобочитаність і, відповідно, знижує вартість обслуговування програм. Python підтримує модулі та пакети, що дозволяє модульності програм та повторному використанню коду. Інтерпретатор Python та загальна стандартна бібліотека доступні у вихідній або двояковій формі безкоштовно для всіх основних

платформ і можуть вільно розповсюджуватися. Оскільки етап компіляції відсутній, цикл редагування-тестування-налагодження неймовірно швидкий. Налаштувати Python просто: помилка або невірний ввід ніколи не виводить помилку сегментації. Щойно цього, коли інтерпретатор виявляє помилку, він виявляє вимкнення[14].

2.2 Принцип роботи алгоритмів штучного інтелекту

2.2.1 Алгоритм лінійної регресії

Лінійна регресія - це підхід до моделювання зв'язку між скалярною відповіддю (або залежною змінною) та однією або кількома пояснювальними змінними (або незалежними змінними)[15].

Коли використовується лінійна регресія взаємозв'язок між даними буде моделюватися за допомогою лінійних функцій.

При розрахунках параметрів моделі лінійної регресії зазвичай застосовується метод найменших квадратів (МНК), але також можуть бути використані інші методи.

Лінійна регресія передбачає побудову прямої лінії, значення якої будуть максимально наближені до фактичного.

Приклад лінійної регресії можна побачити на рисунку 2.1

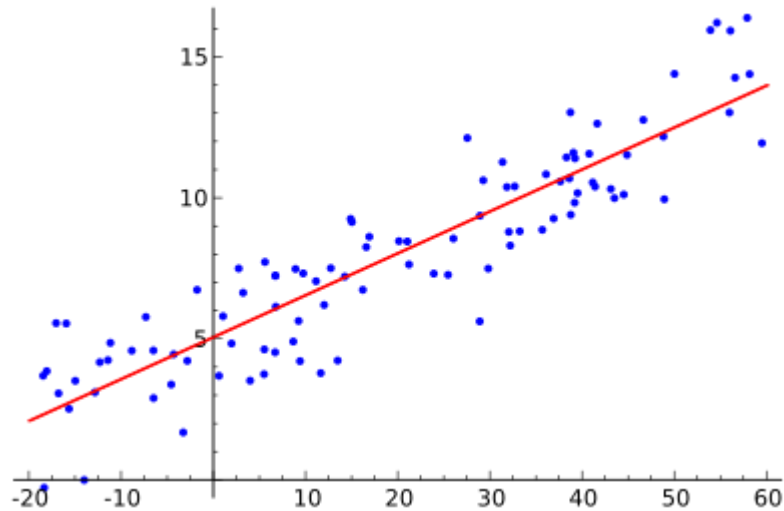


Рисунок 2.1– Графік лінійної регресії для випадкових пов’язаних даних.

2.2.2 Градієнтний бустінг

Історія бустингу проста адже все почалося з питання, чи можна з великої кількості відносно слабких і простих моделей отримати одну сильну. За слабку модель ми маємо на увазі не просто невеликі і прості моделі. У нашому випадку слабкі моделі - це довільні алгоритми машинного навчання, точність яких може бути лише трохи вище випадкового вгадування.

Градієнтний бустинг – це техніка машинного навчання для задач класифікації і регресії, яка будує модель передбачення в формі ансамблю слабких пророкують моделей, зазвичай дерев рішень[16].

Мета будь-якого алгоритму навчання з учителем - визначити функцію втрат і мінімізувати її. Давайте звернемося до математики градієнтного бустінга. Наприклад, в якості опції втрат буде середньоквадратична помилка (MSE):

$$Loss = MSE = \sum (y_i - y_i^p)^2 \quad (1)$$

Де, y_i = ціле значення

y_i^p = передбачення

Ми хочемо, щоб побудувавши наші передбачення таким чином, щоб MSE була мінімальна. Використовуючи градієнтний спуск і оновлюючи

передбачення, засновані на швидкості навчання, шукаємо значення, на яких MSE мінімальна.

$$y_i^p = y_i^p + a * \delta \sum (y_i - y_i^p)^2 / \delta y_i^p \quad (2)$$

Отже, ми просто оновлюємо передбачення таким чином, що сума наших відхилень наближалася до нуля і передбачені значення були близькі до реальних[17].

Логіка, що буде стояти за градієнтним бустингом дуже проста, її можна зрозуміти інтуїтивно без математичного втручання[17].

Перше припущення лінійної регресії, що сума відхилень = 0, тобто відхилення повинні бути випадково розподілені в околиці нуля.

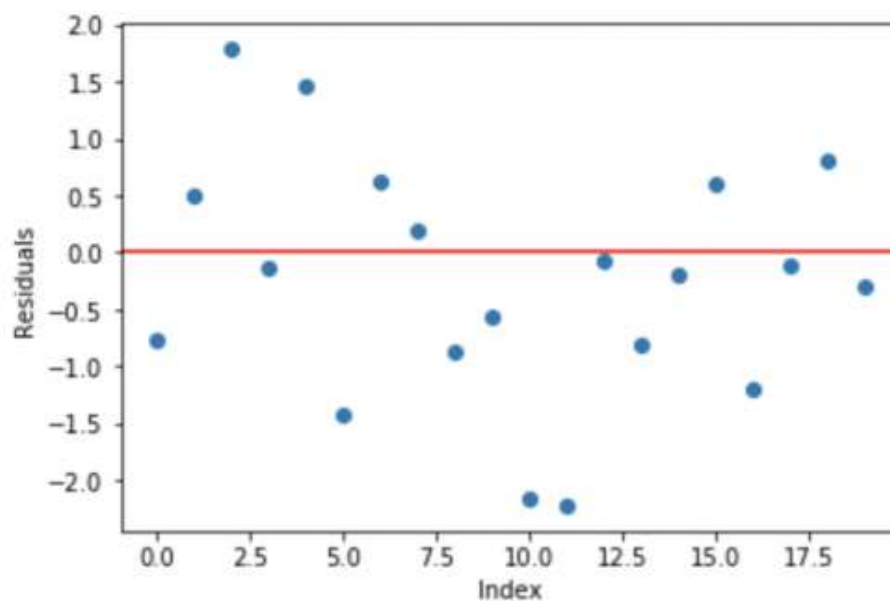


Рисунок 2.2 -Нормальний розподіл вибірки відхилень із середнім 0

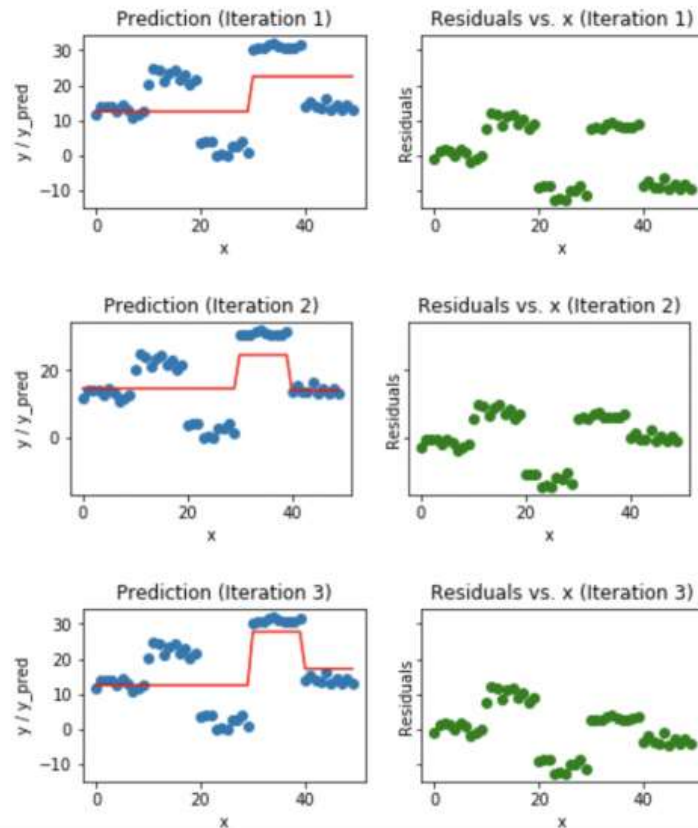


Рисунок 2.3-Візуалізація прокоувань (18-20 ітерації)

Зауважимо, що після 20-ї ітерації відхилення розподілені випадковим чином (тут не говоримо про випадкову нормі) близько 0, і наші прогнози дуже близькі до дійсних значень. Можливо, це хороший момент для зупинки, або наша модель почне перенавчатися[18].

Подивимося як виглядає наша модель після 50-й ітерації.

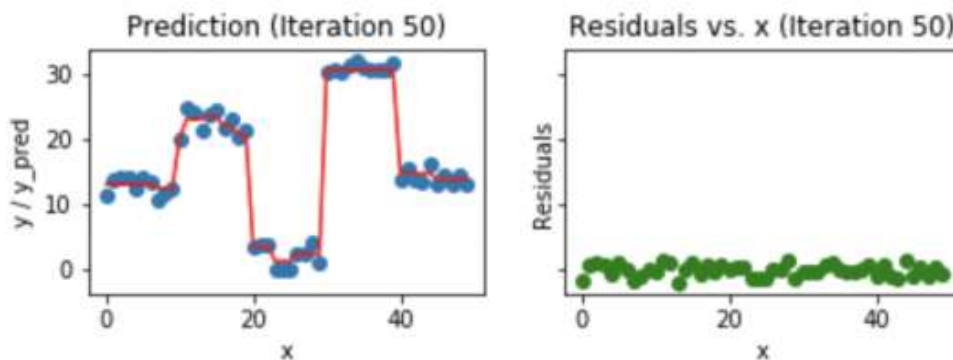


Рисунок 2.3- Візуалізація після 50-й ітерації

Ми бачимо, що після 50-ї ітерації відхилення в порівнянні з графіком x схожі на те, що ми бачимо на 20-й ітерації. Модель стає все більш складною, і передбачення переробляють дані. Таким чином, було б краще зупинитися на 20-й ітерації.

3. Розрахункова частина

3.1 Хід роботи

Спочатку ми будемо отримувати дані за допомогою «matminer», імпортувавши усі необхідні системи для подальшої роботи з даними. Далі ми підгоняємо дані під лінійну регресію, також будемо порівнювати основні дані з розрахованими за допомогою штучного інтелекту (рис 3.1). порівнюємо градієнтом бустингу (рис 3.2).

Також нам необхідно створити масив даних, які ми згенеруємо за допомогою matminer.

Точності моделі є найважливішою частиною процесу створення моделей машинного навчання та важливим критерієм у ефективності роботи.

Розраховуючи дані ми отримуємо для обох систем такі значення

Для лінійної регресії у випадку для питомої теплоємності

$$R^2 = 0.211 = 21.1\%$$

$$RMSE = 21.492$$

Для регресії градієнтного бустингу у випадку для питомої теплоємності

$$R^2 = 0.918 = 91.8\%$$

$$RMSE = 6.926$$

З отриманих даних можемо зробити такий висновок, що градієнт бустингу більш точніший метод ніж перший. За допомогою другого методу можна перевірити наскільки точним є значення.

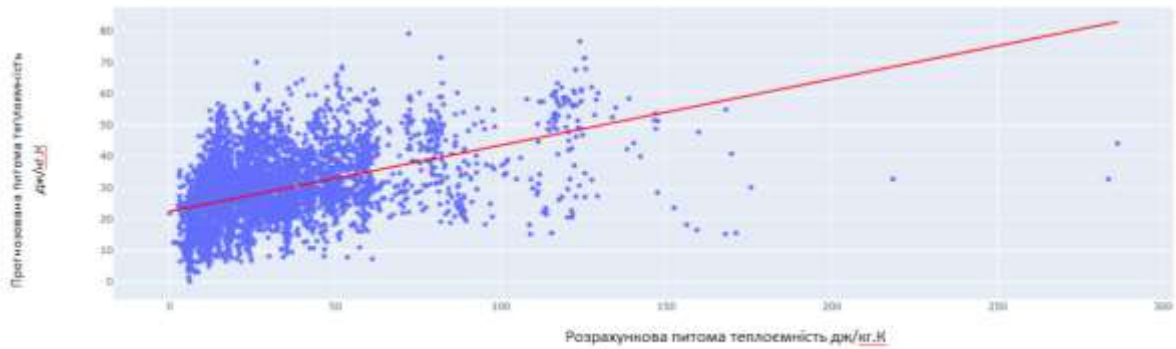


Рисунок 3.1 – Порівняння прогнозованою питомої теплоємності для лінійної регресії

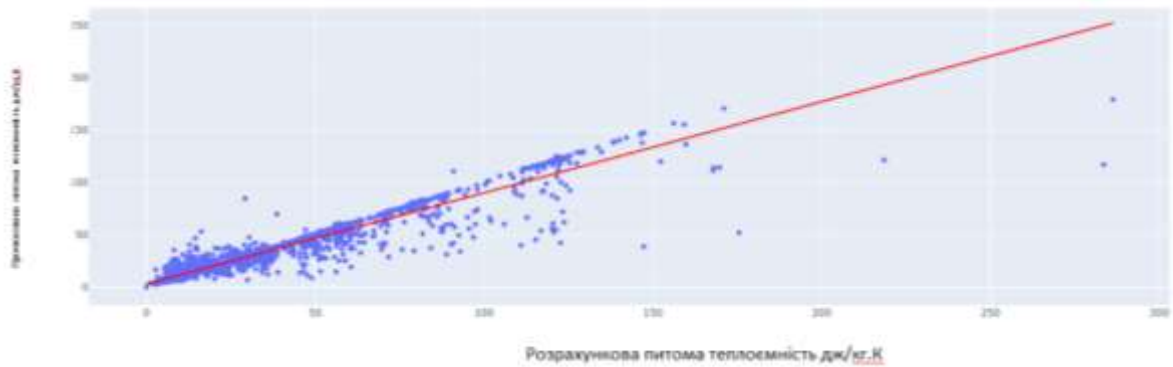


Рис 3.2 – Порівняння прогнозованою питомої теплоємності для градієнтного бустингу

З даних графіків також можемо зробити висновок про точність та мінімальні розходження двох підходів та який саме з них буде ключовим на даному етапі.

Після проведеної роботи з графіками програма надає діаграму на якій показано, які які основні властивості найбільше всього використовуються.

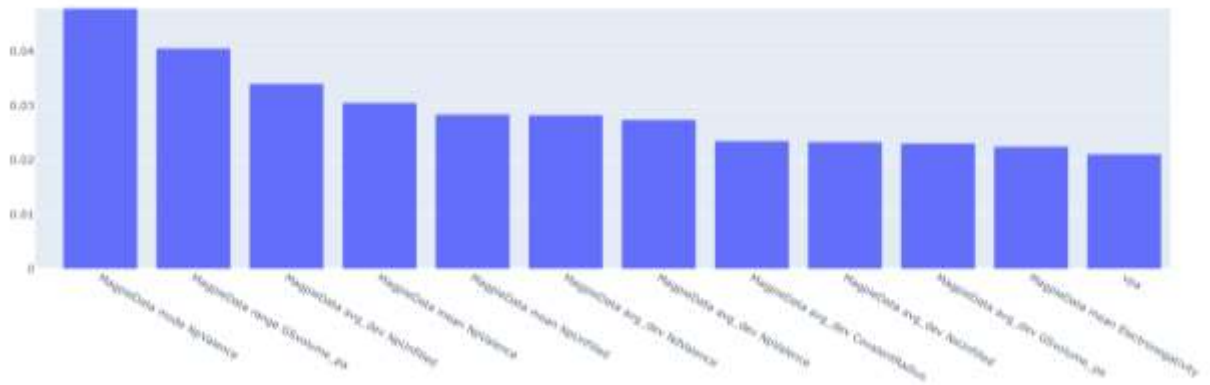


Рисунок. 3.4 - зображена діаграма з найбільшою кількістю використовуваних властивостей в компонентах сплавів. MagpieData avg_dev NrUnfilled-середнє відхилення валентних орбіталей серед елементів, MagpieData mean NrValence- середня кількість заповнених валентних р орбіталей серед елементів у складі, MagpieData mean NUnfilled - середня кількість незаповнених валентних орбіталей серед, vra - обсяг на атом кристалічної структури,

3.2 Результати роботи

Результатами у нашій роботі – прогнозування параметрів сплавів. Так як наш алгоритм працює фактично основуючись на попередніх розрахунках схожих елементів або нових елементів. Слід зазначити, що деякі з розрахунків в силу недосконалості системи будуть досить сильно відрізнятися від істини, що залежить від складності самого матеріалу. Через такі недосконалості деякі параметри не можливо коректно відобразити на графіку.

В даній роботі був проведений розрахунок модуля теплопровідності та теплоємності матеріалів.

Після таких маніпуляцій з даними можна приступаємо до вивчення високоентропійних сплавів, а саме робимо також маніпуляції, як попередньому

пункті (тна цей беремо високоентропійні сплави і проводимо такіж дії, але без графіків).

,Composition,density,vpa
1,Ti15V15Cr20Nb25Mo25,7.45,16.15
2,Ti15V15Cr20Nb25Zr25,6.62,17.88
3,Ti15V15Cr20Nb25Ta25,9.33,16.68
4,Ti15V15Cr20Nb25W25,9.92,15.8
5,Ti15V15Cr20Nb25Hf25,8.65,17.88
6,Ti15V15Cr20Mo25Zr25,6.83,17.5
7,Ti15V15Cr20Mo25Ta25,9.61,16.33
8,Ti15V15Cr20Mo25W25,10.22,15.46
9,Ti15V15Cr20Mo25Hf25,8.9,17.5
10,Ti15V15Cr20Zr25Ta25,8.57,18.07
11,Ti15V15Cr20Zr25W25,9.11,17.14
12,Ti15V15Cr20Zr25Hf25,7.96,19.32
13,Ti15V15Cr20Ta25W25,12.1,15.97
14,Ti15V15Cr20Ta25Hf25,10.58,18.07

Таблиця.3.1 властивості викосоентропійних сплавів

Отримані дані виводяться у виді таблиці ехсел. Для цього потрібно зайві властивості видалити, а необхідні залишити, щоб при порівнянні були коректні властивості для точного показника даних в таблиці та графіках.

	MagpieData range CovalentRad ius	MagpieData avg_dev CovalentRadiu s	MagpieD ata mode Covalent Radius	MagpieD ata avg_dev NdValenc e	MagpieD ata range GSvolum e_pa	heat_capacity	Composition
0	25	6,6	154	0,9	6,99	44,1622063	Ti15V15Cr20Nb25Mo25
1	36	10,15	164	1,075	12,005	29,0309231	Ti15V15Cr20Nb25Zr25
2	31	9,275	164	0,85	6,99	37,6470673	Ti15V15Cr20Nb25Ta25
3	25	7,875	162	0,75	6,99	40,21323612	Ti15V15Cr20Nb25W25
4	36	10,15	164	1,075	11,01	27,00911806	Ti15V15Cr20Nb25Hf25
5	36	9,9	154	1,35	12,005	35,63872152	Ti15V15Cr20Mo25Zr25
6	31	8,4	154	1,125	6,93	31,03769366	Ti15V15Cr20Mo25Ta25
7	23	6,125	154	0,9	5,5	27,53539019	Ti15V15Cr20Mo25W25
8	36	9,9	154	1,35	11,01	33,44730784	Ti15V15Cr20Mo25Hf25
9	36	11,5	170	0,8	12,005	28,57688387	Ti15V15Cr20Zr25Ta25
10	36	9,8	162	1,075	12,005	40,76688665	Ti15V15Cr20Zr25W25

Таблиця. 3.1 - Отримані основні середньостатистичні властивості сплавів після детального аналізу

Отримані дані виводяться у виді таблиці excel, які потім можна використати в Colaboraty для порівняння властивостей вправів у вигляді точкового графіка.

Оскільки були отримані коректні основні середньостатистичні властивості сплавів ми можемо їх порівняти між собою та побачити різницю між ними у вигляді точкового графіка.



Рисунок 3.1 - Властивості сплаву за обсягом атомної кристалічної структури та теплоємністю

Далі ми провели аналіз $\text{Ti}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Zr}_{25}\text{r}_{25}\text{W}_{20}\text{Hf}_{15}$ та змогли подивитися теплопровідність даного елемента. Це ми можемо побачити на рисунку 3.2.



Рисунок 3.2- Властивості сплаву за теплоємністю
 $\text{Ti}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Zr}_{25}\text{r}_{25}\text{W}_{20}\text{Hf}_{15}$

Він має гарну теплоємність. Теплоємність буде визначатися кількість тепла, необхідного для нагрівання.

Висновок

У даній роботі були розшлянуті тагкі теми, а саме моделювання теплопровідності та їх ознаки. Також розглянули ,що таке високоентропійні сплави, теплоємність. Привели приклади цих методів та їх ознаки.

Як ми зрозуміли у термодинаміці і фізиці твердого тіла модель Дебая — метод, розвинений для оцінки фононного внеску до теплоємності твердого тіла. Модель Дебая розглядає коливання кристалічної ґратки як газ квазічастинок (фононів) у ящику, на відміну від моделі Ейнштейна. Ця модель буде точніше передбачає залежність теплоємності за низьких температур.

Бустінг краще для великих навчальних вибірок і для класів з межами складної форми.але в ньому переважають як переваги так і недоліки

За допомогою програми Colabory (python та jupyter) у роботі вийшло розрахувати такі параметри як теплопровідність, теплоємність. Такі сплави дуже добре витримують високі температури, мають високу щільність та інші властивості.

Список використаної літератури:

1. Мікроструктура і фізико-механічні властивості високоентропійного сплаву AlCrCoNiCuFe_x / М.В. Карпець, О.М. Мисливченко, О.С. Макаренко, М.О. Крапівка, В.Ф. Горбань // Фізика і хімія твердого тіла. – 2014. – Т.15, №3. – С. 661-665.
2. . Влияние содержания никеля на износостойкость литого высокоэнтропийного сплава VCrMnFeCoNi_x / М.В. Карпец, В.Ф. Горбань, А.Н. Мысливченко, С.В. Марченко, Н.А. Крапивка // Новые материалы. – 2015. – №1. – С. 56-61.
3. Структура и свойства высокоэнтропийных сплавов и нитридных покрытий на их основе / А.Д. Погребняк, А.А. Багдасарян, И.В. Якущенко, В.М. Береснев // Успехи химии. – 2014. – №83 (11). – С. 1027-1061.
4. High-Entropy Alloys – A New Era of Exploitation / J.W. Yeh, Y. L. Chen, S. J. Lin and oth. // Materials Science Forum. – 2007. – №3. – P. 1-9.
5. Фирстов С.А., Горбань В.Ф., Крапивка Н.А. Механические свойства литых многокомпонентных сплавов при высоких температурах // Институт проблем материаловедения НАН Украины. — 2008. — Вып. 17. — С. 126—139.
6. E. D. Tabachnikova *et al.*, “Mechanical properties of the high-entropy alloy Al_{0.5}CoCrCuFeNi in various structural states at temperatures of 0.5-300 K,” *Low Temp. Phys.*, vol. 43, no. 9, pp. 1108–1118, 2017, doi: 10.1063/1.5004457.
7. : A.Magnus, A.Hodler, Measurements of the specific heat of silver and of diamonds in high temperatures ,*Annalen der Physic*,80, 808(1926)
8. Tong CJ, Chen YL, Chen SK, Yeh JW, Shun TT, Tsau CH, Lin SJ, Chang SY. Microstructure characterization of Al_xCoCrCuFeNi high-entropy alloy system with multiprincipal elements. *Metall Mater Trans A*. 2005;36:881–893
9. Sosso, G. C., Deringer, V. L., Elliott, S. R., & Csányi, G. (2018). Understanding the thermal properties of amorphous solids using machine-learning-based interatomic potentials. *Molecular Simulation*, 44(11), 866–880.

10. Міждисциплінарний журнал з матеріалознавства та хімії та фізики твердого тіла <https://www.journals.elsevier.com/journal-of-alloys-and-compounds>
11. Peter Flach. Machine Learning The Art and Science of Algorithms that Make Sense of Data / Peter Flach. – USA: Cambridge University Press. – 409 с.
12. Characterization, corrosion resistance and hardness of rapidly solidified Ni-Nb alloys / Conrado R.M. Afonso, Katherine Martinez-Orozco, Vicente Amigo та ін.]. // Journal of Alloys and compounds. – 2020. – №829. – С. 12
13. M. Widom: Prediction of structure and phase transformations. In High-Entropy Alloys: Fundamentals and Applications, M.C. Gao, J.W. Yeh, P.K. Liaw, and Y. Zhang, eds. (Springer International Publishing, Cham, 2016); p. 267
14. Carrete, J., Li, W., Mingo, N., Wang, S., & Curtarolo, S. (2014). Finding unprecedentedly low-thermal-conductivity half-Heusler semiconductors via high-throughput materials modeling. *Physical Review X*, 4(1), 1–9.
15. Journal of Alloys and Compounds journal homepage: <http://www.elsevier.com/locate/jalcom>
16. Thermal Physics and Thermal Analysis From Macro to Micro, Highlighting Thermodynamics, Kinetics and Nanomaterials
17. N.P. Gurao and Biswas Krishanu, In the quest of single phase multi-component multiprincipal high entropy alloys. *J. Alloys Compd.* 697, 434 (2017).
18. Gaskell DR. Introduction to the thermodynamics of materials. 3rd ed. Washinton (DC): Taylor & Francis; 1995.
19. Tsai MH. Physical properties of high entropy alloys. *Entropy*. 2013;15:5338–5345

20. Machine Learning Prediction of Heat Capacity for Solid Inorganics Steven K. Kauwe¹ · Jake Graser¹ · Antonio Vazquez¹ · Taylor D. Sparks¹ Received: 5 February 2018 / Accepted: 6 May 2018 © The Minerals, Metals & Materials Society 2018