

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОГНОСТИЧНОЇ ЗДАТНОСТІ БАГАТОВИМІРНИХ ДІАГРАМ ДАРКЕНА-ГУРРІ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ МЕЖ РОЗЧИННОСТІ В МІДНИХ СПЛАВАХ

Колупаєв І. М., Ширяєва М. А.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

Досліджується потенціал діаграм Даркена-Гуррі (Д-Г) для кількісного прогнозування меж розчинності в металевих системах, зокрема в мідних сплавах. Традиційно ці діаграми покладаються на емпіричні правила для отримання якісних висновків [1]. Ми пропонуємо новий підхід, який використовує багатовимірний Д-Г фреймворк, не накладаючи обмежень на кількість вхідних параметрів або їх фізичну інтерпретацію.

Методи машинного навчання застосовуються для аналізу взаємозв'язків між різними параметрами Д-Г діаграми та відповідними межами розчинності в мідних сплавах. Проблема класифікації вирішується за допомогою алгоритму, який поєднує методи інтелектуального аналізу даних, зменшення розмірності та візуалізації. Введено чотири категорії предикторів: (1) термодинамічні, (2) деформаційні, (3) структурні та (4) емпіричні. Прогностична сила кожного предиктора оцінюється за допомогою його "дисперсії головного компонента".

Результати демонструють успішне прогнозування значень розчинності в межах певного діапазону мідних сплавів [2]. Цей підхід пропонує значне вдосконалення порівняно з традиційними якісними прогнозами на основі Д-Г діаграми, що потенційно може призвести до більш точних оцінок меж розчинності.

Запропонований метод може визначити оптимальну комбінацію вхідних параметрів в межах Д-Г діаграми, підвищуючи загальну прогностичну здатність моделі. Ця робота прокладає шлях до використання Д-Г діаграм не тільки для якісного розуміння, але й для кількісного прогнозування меж розчинності в системах металевих сплавів.

Література:

1. Mae, Yoshiharu. "What the Darken–Gurry plot means about the solubility of elements in metals." *Metallurgical and Materials Transactions A* 47.12 (2016): 6498-6506.
2. Zhang, Y. M., Yang, S., & Evans, J. R. G. (2008). Revisiting Hume-Rothery's Rules with artificial neural networks. *Acta Materialia*, 56(5), 1094-1105.