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

Кваліфікаційна робота бакалавра

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ВИСОКОЕНТРОПІЙНИХ СПЛАВІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Студент гр. ФЕ-71 О. О. Кириченко

Науковий керівник

к.ф.-м.н. ст. викл. В. М. Рогоз

Суми – 2021

Реферат

Мета роботи – дослідження методів моделювання властивостей сплавів за допомогою машинного навчання.

Робота присвячена дослідженню можливостей використання базових принципів та інтеграції машинного навчання для отримання теплопровідності та порівняння цих властивостей с іншими високоентропійними сплавами.

В даній бакалаврській роботі було проведено наукове дослідження методів аналізування та прогнозування параметрів високоентропійних сплавів використовуючи принципи машинного навчання. Для виконання завдання були розглянуті основні поняття з побудови машинного навчання, було розглянуто який саме алгоритм машинного навчання буде використаний в розрахунковій роботі. Був проаналізований алгоритм роботи, а також були отримані певні значення на основі титану, ванадію, хрому, ніобію, танталу, вольфраму, цирконію, гафнію та інших. 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 31-ій сторінці, зокрема містить 2 таблиці, 9 формул, 13 рисунків та список цитованої літератури із 26 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ВИСОКОЕНТРОПІЙНІ СПЛАВИ, ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, ЩІЛЬНІСТЬ, ТЕПЛОЄМНІСТЬ, МАШИННЕ НАВЧАННЯ, МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ, ПОРІВНЯННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ.

Зміст

Вступ 4
1 Літературний огляд 5
1.1 Високоентропійні сплави 5
1.1.1 П’ятикомпонентні сплави 6
1.1.2 Шестикомпонентні сплави 8
1.2 Огляд методів дослідження теплоємності сплавів 10
1.2.1 Огляд експериментальних методів 12
1.2.2 Огляд методів моделювання 13
1.2.2.1 Теорія функціональності щільності розрахунків 14
1.2.2.2 Гібридне моделювання МК / МД 16
1.2.2.3 Моделювання CALPHAD 16
2 Методи дослідження 17
2.1 Використання програми Colaboratory ті розгляд її компонентів .. 17
2.2 Практична частина 18
3 Розрахункова частина 21
3.1 Властивості сплавів за обсягом атомної кристалічної структури та теплопровідністю 23
3.2 Щільність сплавів та теплопровідність 26
Висновки 28
Список використаних джерел 29

Вступ

В цій дипломній роботі ми розглянемо,що таке високоентропійні сплави(ВЕСи),теплопровідність та моделювання теплопровідності.

Робота буде зосереджена саме на методах машинного навчання, створена з синергії існуючих розрахункових модулей, а також модулей для вилучення даних (python + jupyter), та їх подальший розрахунок даних, таких як модуль темлоємності та теплопровідності для сплавів, а також подальше спрощення аналізу нових, або існуючих сплавів.

Високо-ентропійні сплави (ВЕСи) з декількома основними елементами відкривають практично нескінченний простір для проектування нових матеріалів. Вони (ВЕСи) часто визначають як багатоголовні складові сплави, що містять більше 5 елементів у 5–35%. Хоча це визначення на основі складу не вказує на структуру чи обсяг сплаву, пошук високо-ентропійних сплавів у більшості випадків збігається з пошуком багатокомпонентних однофазних твердих розчинів. Понад 99% зареєстрованих ВЕСів складаються з кубічних одно- або декількох спільно існуючих фаз.

Теплопровідність - це властивість, яка описує здатність матеріалу передавати тепло, і це одна з важливих теплофізичних властивостей алюмінієвих сплавів. Більш того, висока теплопровідність алюмінієвих сплавів дозволяє швидко переносити тепло, рівномірний розподіл температури та ефективне охолодження, що пригнічує утворення механічних шкідливих дефектів у гарячих точках і зменшує термічно викликані напруги, а отже, покращує втомні властивості. Через те, що визначення теплопровідності є дорогим і трудомістким, систематичні дослідження теплопровідності сплавів все ще відсутні. Тому необхідний ефективний чисельний метод отримання теплопровідності сплавів.

1. Літературний огляд

1.1 Високоентропійні сплави

Сплави з високою ентропією (ВЕСи) - це сплави з п’ятьма або більше головними елементами. Завдяки чіткій дизайнерській концепції ці сплави часто виявляють незвичні властивості. Таким чином, спостерігається значний інтерес до цих матеріалів, що веде до нової, захоплюючої галузі. У цій роботі коротко розглядаються деякі критичні аспекти ВЕСів, включаючи ефекти серцевини, фази, кристалічні структури та їх властивості. Також вказуються на сучасні виклики та важливі напрямки майбутнього.

Більшість звичайних сплавів базуються на одному основному елементі. Для покращення його властивостей до основного елементу додаються різні типи легуючих елементів, що утворюють сімейство сплавів на основі основного елемента. Наприклад, сталь базується на Fe, а алюмінієві сплави - на основі Al. Однак кількість елементів у періодичній системі обмежена, отже, сім'ї сплавів, які ми можемо розробити, також обмежені. Якщо сконструювати сплави не з одного або двох «базових» елементів, а з багатьох елементів, що отримаємо? Ця нова концепція, вперше запропонована в 1995 р. [1], була названа високоентропійним сплавом (ВЕСом)[2].

Сплави високоентропійних елементів представляють цікаві можливості та проблеми для обчислювального моделювання їх структури та фазової стійкості. Останній інтерес спричинив швидкий розвиток методів та не менш швидке зростання нових результатів. Статистичні механічні підходи включають розкладання кластерів, гібридне моделювання Монте-Карло / молекулярної динаміки та вилучення ентропії з кореляційних функцій. Наведено численні приклади програм, що висвітлюють недавній прогрес, використовуючи представлені концепції та методи. Однак, на відміну від цих очікувань, експериментальні результати показують, що більша ентропія змішування в цих сплавах полегшує утворення фаз твердого розчину з простими структурами і, таким чином, зменшує кількість фаз. Такі символи, мають першорядне значення для

розробки та застосування цих сплавів. Тому ці сплави називали сплавами з високою ентропією.

1.1.1 П’ятикомпонентні сплави

Нещодавно новий клас сплавів, заснований на теорії сплавів з високою ентропією (ВЕСи) з 2004 року змінили традиційну концепцію дизайну сплаву. ВЕС визначається як сплав, що складається з 5 або більше видів основних елементів при рівних мольних співвідношеннях або поблизу еквімолярних пропорцій, з різницею радіусу елемента менше 15% і зі змістом кожного елемента між 5% і 35%. Крім того, такі багатоядерні сплави утворюють простий твердий розчин і аморфну фазу, а не складну структуру, що складається з багатьох інтерметалічних сполук. Ці структурні характеристики пояснюються високим ефектом ентропії та великим спотворенням грат, а також млявим дифузійним ефектом. У порівнянні з традиційними сплавами, ВЕСи демонструють хороші комбінації міцності та пластичності, виняткову термостабільність, чудову твердість нагрівання та пом'якшення і відмінну стійкість до корозії та зносу, що робить їх потенційні матеріали для застосувань, що вимагають високої температури, міцності та стійкості до корозії. На сьогоднішній день для підготовки ВЕСів використовуються багато способів обробки, такі як плавлення дуги, агломераційне спікання плазми, механічне легування, осадження плазмовим розпиленням, осадження розпилення та лазерне покриття. Тим часом розроблено багато систем ВЕСів. Легуючими елементами, які найчастіше використовуються в ВЕСах, Al, Co, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni, Ti. На основі цих елементів були розроблені ВЕСи, такі як AlCoCrFeNi, $AlCoCrFeNiTi_{0.5}$, AlxCoCrCuFeNi, GdxCoCrCuFeNi та CoCrFeNiZrx. Крім того, AlxCoCrFeNi являє собою типовий ВЕС, його мікроструктури та механічні властивості були широко досліджені. Хоча велика частина цих літератур, пов'язаних з вищезазначеними матеріалами, повідомляла лише про тверді розчини з простими кристалічними структурами, такими як кубічні структури, орієнтовані на обличчя або тіло та пов'язані з ними структури суперрешітки, очікується, що мікроструктура

цих сплави все ще будуть містити різноманітні інтерметалічні сполуки, а ВЕСи також можуть містити незначні елементи, що змінюють властивості базового ВЕСу . Такі вчені як Ванг та інші повідомлялі, що, по мірі збільшення мольних співвідношень Al, мікроструктури AlxCoCrFeNi перетворюються з початкової єдиної в центрі кубічної (ГК) структури в змішаної гране центрованої кубічної ГЦК і об'ємно центрированную кубіческую ОЦК структур, нарешті, до єдиної структури ГЦК, тим часом твердість зростає з 120 HV до 527 HV. Однак, вартість ВЕСів значно вища завдяки додаванню дорогих елементів у великих масштабах, таких як Co, що часто є основною причиною обмежень у їх застосуваннях. Для вирішення цього питання тут розглядаэться вплив мольних співвідношень Al:Co на фази та мікроструктури сплавів AlXCrCo2-XFeNi. На сьогоднішній день дослідження впливу мольних співвідношень Al: Co на мікроструктури та властивості ВЕСів не повідомлялося. Щоб виділити вплив Al та зменшити кількість доданого Co, щоб мінімізувати витрати при збереженні хороших механічних властивостей, співвідношення Al:Co були змінені. Крім того, досліджено характеристики зносу та стиснення сплавів AlXCrCo2-XFeNi[1-9].

Таблиця 1.1

Номінальний склад сплавів AlXCrCo2-XFeNi.

Номінальний склад сплавів (у %)		Хімічний склад (у %)					Молярне відношення
		Al	Cr	Co	Fe	Ni	Al/Co
X = 1.0	AlCrCoFeNi	20	20	20	20	20	1:1
X = 1.2	$Al_{1.2}CrCo_{0.8}FeNi$	24	20	16	20	20	1.2:0.8
X = 1.4	$Al_{1.4}CrCo_{0.6}FeNi$	28	20	12	20	20	1.4:0.6
X = 1.6	$Al_{1.6}CrCo_{0.4}FeNi$	32	20	8	20	20	1.6:0.4

Таблиця 1.2

Хімічний аналіз різних областей і фаз за допомогою енергодисперсної спектроскопії в сплаві AlCrCoFeNi.

Сплави	Номінальний склад (у %)	Фази	Хімічний склад (у %)				
			Лі	Cr	Co	Fe	Ni
X = 1.0	AlCrCoFeNi	Невпорядковане ОЦК	0.99	44.81	20.50	30.46	3.22
		Упорядковане ОЦК	25.%	7.34	20.23	14.48	31.96
		ГЦК	6.28	27.45	24.07	26.08	16.09

Зразки виготовляли шляхом іскрового спікання плазми у вакуумі. Елементи порошків (чистота вище 99,95%) Al, Cr, Co, Fe та Ni ретельно перемішували за допомогою планетарного кульового млина. Чотири сипучі сплави з номінальними складами, а саме AlCrCoFeNi, $Al_{1.2}CrCo_{0.8}FeNi$, Al1.4CrCo0.6FeNi та $Al_{1.6}CrCo_{0.4}FeNi$ (табл. 1.1), іскрову плазму спікали у вакуумі та утворювали у графітовій штампі Діаметр 15 мм за допомогою високоякісних елементарних компонентів. Потім чотири види зразків порошку нагрівали від кімнатної температури до 1473 К зі швидкістю нагрівання 100 К / хв. Під час спікання підтримували тиск 32 МПа на обох кінцях електрода. Розмір циліндричного зразка печеного ВЕСа становив Ф 15 мм х 10 мм[10,11,15].

1.1.2 Шестикомпонентні сплави

В останні роки наукова література демонструє підвищений інтерес до вивчення сплавів нового класу, тобто сплавів з високою ентропією, що містять кілька основних елементів із близьким відсотком. Деякі склади цих сплавів, вироблені в останні роки, характеризуються високою твердістю, міцністю, зносостійкістю та термостійкістю, завдяки чому їх розглядають як перспективні матеріали нового покоління для використання у функціональних та конструктивних цілях. Поліпшення фізико-механічних, технологічних та експлуатаційних характеристик цих сплавів неможливе без систематичних досліджень особливостей

їх будови та властивостей з метою розробки оптимальних хімічних складів та режимів термічної або термомеханічної обробки.

Використання методів аналітичної просвічувальної електронної мікроскопії, скануючої електронної мікроскопії, енергетично-дисперсійної рентгенівської спектроскопії, тривимірної атомно-зондової томографії (3D-AP), рентгеноструктурного аналізу, рентгенівського дифракційного аналізу та вимірювань нано- і мікротвердостей та модулів пружності, ми виявили, що литі або швидко гартувані (швидкість загартування 106–107 К / с) рівноатомні сплави AlCrFeCoNiCu характеризуються переважним утворенням однорідної дрібнозернистої ОЦК структури. Литі сплави піддаються розкладанню з осадженням багатокомпонентних нанофаз переважно пластинчастої або рівноосної морфології, як атомно впорядкованих (B2, $L1_2$), так і невпорядкованих (A2) з різним хімічним складом, в матриці ОЦК. Більше того, для них характерні періодичні коливання концентрації та сегрегації хімічних елементів (кластери порядку декількох нанометрів), які містять різні комбінації елементів. Наприклад, надшвидке гартування, напр., Розбризкуванням розплаву, дало можливість не тільки сформувати ультрадисперсну структуру, але й суттєво придушити розкладання цих сплавів.Усі нанофази, знайдені в сплавах, а також кластери, є багатокомпонентними твердими розчинами, включаючи атомно впорядковані розчини та збагачені кількома елементами, в основі яких лежать Cu–Ni–Co-Al,Ni–Al-Co–Fe, та системи Cr–Fe–Co, просторовий розподіл яких характеризується значною наномодуляцією елементарного та фазового складу в основній масі сплаву.

Були розглянуті дослідження специфічних особливостей структури та фізичних властивостей високоентропного еквіатомного сплаву AlCrFeCoNiCu, що швидко гартується з розплаву[1-9,12,13,16].

Структура і фізичні властивості

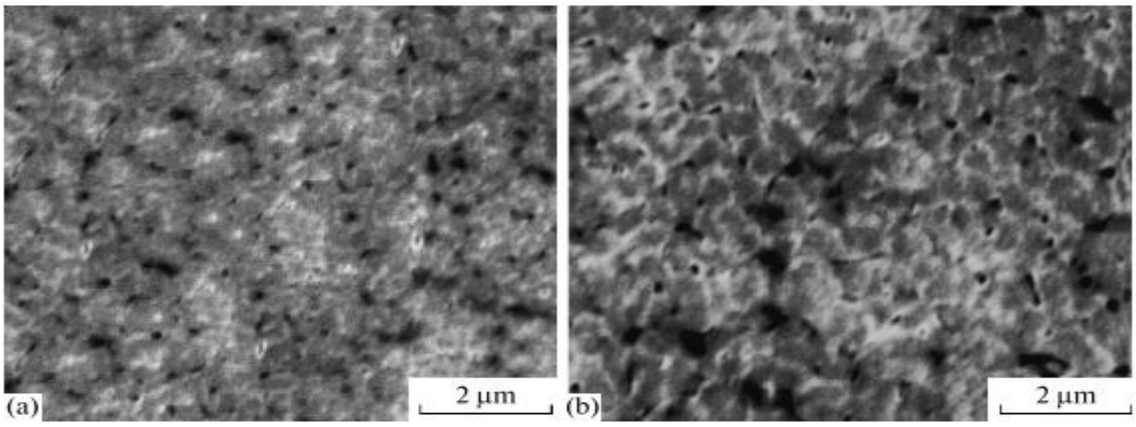

Рис.1.1 – Зображення вторинних електронів в електромагнітному електромагнітному спектрі сплаву RQM AlCrFeCoNiCu (a) до нагрівання та (b) після нагрівання до 770 K протягом 2 годин.

1.2 Огляд методів дослідження теплоємності сплавів

З бурхливим розвитком методів машинного навчання останнім часом зростає інтерес до розробки моделей для вирішення інженерних задач на основі аналізу даних, одночасно обходячи детальне розуміння фізичного механізму або проведення експериментальних вимірювань. Наприклад, Чжан спробував різні моделі машинного навчання, щоб передбачити температурний опір інтерфейсу між двома матеріалами, і виявив, що методи машинного навчання можуть бути більш точними, ніж загальновживані моделі акустичної невідповідності та моделі дифузного невідповідності. Серед методів машинного навчання регресія опорного вектора (SVR, РОВ, регресія опорного вектора) є простою, точною та надійною моделлю для нелінійного регресійного аналізу. Окрім регресії опорного віку, регресія процесу Гауса (GPR, РПГ, регресія процесу Гауса) є ще одним звичайним методом машинного навчання для регресії і може бути використана для вирішення проблем нелінійної регресії. Оскільки прогнозування ефективної теплопровідності композиційних матеріалів з різних факторів є проблемою нелінійної регресії, РОВ та РПГ можуть бути придатними. На додаток до РОВ та РПГ, метод глибокого навчання з використанням нейронної мережі швидко розвивається та успішно

застосовується до розпізнавання зображень та виявлення об'єктів як сучасний підхід методів комп'ютерного зору. Згорткова нейронна мережа (CNN, ЗНМ, Згорткова нейронна мережа) широко застосовується при розпізнаванні обличчя та виявленні об'єктів і досягає дуже хорошої точності. Для композиційних матеріалів також необхідно виділити структурні особливості та з’ясувати співвідношення між цими структурами та кінцевою ефективною властивістю. Подібно до розпізнавання обличчя, ЗНМ може бути прийнятий, щоб врахувати особливості мікроструктури в композиційних матеріалах.

Виходячи з вищезазначених міркувань, пропонується основа для використання методів машинного навчання, включаючи РОВ, РПГ та ЗНМ для вивчення тепловіддачі у композиційних матеріалах та пористих середовищах. Підходи до машинного навчання можна розглядати як напіваналітичні моделі, і з цього погляду він схожий на ЕМТ (ТЕС, Теорія ефективного середовища), оскільки може забезпечити швидке прогнозування з незначними обчислювальними витратами. Різниця полягає в тому, що ТЕС базується на фізичному розумінні, а машинне навчання - на аналізі даних. Можна наголосити, що підхід до машинного навчання є доповненням (а не заміною) фізичного моделювання та експериментальних вимірювань. Це можна розглядати як модель, яка може забезпечити швидке прогнозування композиційного матеріалу без вирішення трудомістких PDE (ДРЧП, диференціальні рівняння з частинними похідними) або проведення експериментів. Така загальна ідея вилучення інформації з даних нещодавно була продемонстрована у матеріалознавчому співтоваристві і важливість усвідомлена. Щоб продемонструвати здатність методів машинного навчання для аналізу теплопередачі, була створена база даних, яка використовує набір генерації структури квартету (QSGS, НГСК, набір генерацій структури квартету), щоб сформувати структуру композитного матеріалу та застосувавши LBM (РМБ, решітчастий метод Больцмана) для розрахунку ефективної теплопровідності.

РОВ та РПГ - це контрольовані методи навчання для регресійного аналізу, які роблять різні припущення. З точки зору вивчення теплопередачі в композиційних

матеріалах, обидва вони можуть бути використані для отримання моделей для прогнозування ефективної теплопровідності (або «об'єктивних значень») з розподілу та властивостей включень (або «дескрипторів»). Параметри моделей вивчаються з набору навчальних даних, що містить n фрагментів даних, D = {(xi, yi) | i = 1, 2 ... n}, серед яких x_i - вектори, що складаються з усіх дескрипторів, а y_i - об'єктивні значення.

Для того, щоб вирішити проблеми нелінійної регресії, РОВ відображає вхідний простір (змінними є дескрипторами) у просторовий простір ознак (змінні - нелінійне перетворення дескрипторів), а потім виконує лінійну регресію в просторі ознак. Функція простору визначається функціями ядра, тому функція регресії буде лінійною комбінацією цих функцій. Для цього можна вибрати функцію Гауса, яку також називають радіальною базовою функцією (RBF, РБФ), як функцію ядра:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{2\sigma^2}\right) = \exp(-\gamma\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2), \tag{1}$$

що зазвичай використовується, якщо немає попередніх знань про реальний розподіл даних.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n}(\alpha_i - \alpha_i^*)K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) + b \tag{2}$$

Остання функція регресії - це де a, a* - множники Лагранжа, a b - зміщення. Після отримання цих коефіцієнтів можна передбачити відповідне прогнозне значення f (x) за допомогою рівняння. (2), з дескрипторами x, яких не спостерігається у наборі навчальних даних[23][24][26].

1.2.1 Огляд експериментальних методів

У 1940-х рр. Даркен і Гаррі систематично приділяли увагу нестехіометрії, що призвело до їх чудових досліджень рівноваг у системі Fe – O, включаючи експериментальні методи (наприклад, метод контрольованої атмосфери,а саме

загальне пошкодження від холоду) для дослідження рівноваг між конденсованими системами та їх газоподібне оточення. Повідомлялося також про нестехіометрію щодо оксидів актинідів, що використовуються на перших атомних електростанціях, для магнітних феритів, твердих електролітів, гідридів металів тощо.

В даний час неорганічні матеріали, що виявляють різну ступінь нестехіометрії, використовуються в багатьох технічних цілях, таких як конструкційні матеріали, вогнетриви, перетворення енергії, функціональні деталі в електроніці та оптоелектроніці, захисні покриття, гетерогенний каталіз та багато інших. У переважній більшості цих застосувань властивості матеріалу та стабільність фази відіграють вирішальну роль, безпосередньо визначаючи первинну функціональність даного матеріалу та обмежуючи умови, за яких він може безпечно та ефективно експлуатуватися.

На властивості матеріалу може суттєво вплинути наявність дефектів і розладів, і в багатьох випадках контрольоване введення дефектів є ключем до адаптації отриманих характеристик матеріалу. Порівняно з іншими матеріалами, такими як метали або полімери, особливою особливістю багатьох неорганічних матеріалів, таких як оксиди, нітриди, гідриди та інші, є змінна стехіометрія деяких компонентів, що походить від їх обміну з навколишньою атмосферою та накладення двох видів дефектів: первинні дефекти, що встановлюють відхід від стехіометрії (вакансії, інтерстиції), та компенсуючі дефекти, що забезпечують баланс заряду (змішана валентність, зарядні полярони). З термодинамічної точки зору такі системи класифікуються як частково відкриті системи, оскільки вміст спільних компонентів в конденсованій системі не є стабільним і може в принципі контролюватися станом навколишньої атмосфери[22][24][25].

1.2.2 Огляд методів моделювання

До методів моделювання можна віднести метод Гріна-Кубо. При рівноважному моделюванні молекулярної динаміки досліджувана система має постійну середню температуру та середній тепловий потік нуль. Однак у кожен момент часу кінцевий тепловий потік існує через миттєві коливання температури. Популярний метод

Гріна-Кубо (Green 1954; Kubo 1957), заснований на загальній теоремі про коливання-розсіювання (Kubo 1966), пов'язує решітчасту теплопровідність системи з часом, необхідним для розсіювання таких коливань

$$k_{ij} = \frac{V}{k_B T^2} \int_0^\infty \langle q_i(0) q_j(t) \rangle dt \tag{3}$$

де kij - складова тензора теплопровідності решітки (i і j = x, y або z), V об'єм системи, kB постійна Больцмана, T температура системи, q_i (0) миттєвий тепловий потік в напрямок $_j$ в момент часу нуль і q_j (t) миттєвий тепловий потік в напрямку і в момент часу t. Кутові дужки праворуч вказують середнє значення за часом походження. Хоча верхня межа інтегралу нескінченна, тривалість моделювання повинна перевищувати лише час релаксації, за який інтеграл зникає (формула 4).

$$q_i = -k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \tag{4}$$

При моделюванні молекулярної динаміки час дискретизується на часові кроки, і, отже, на практиці рівняння (3) стає підсумовуванням (Schelling et al. 2002)

$$k_{ij} = \frac{V \Delta t}{k_B T^2} \sum_{m=1}^{M} (N-m) \sum_{n=1}^{N-m} q_i(m+n) q_j(n) \tag{5}$$

де N - загальна кількість кроків у часі, кожен з довжини Δt, q_i (m + n) миттєвий тепловий потік у напрямку і на кроці часу m + n і q_j (n) миттєвий тепловий потік в j напрямок на кроці часу n. Миттєвий тепловий потік у заданому напрямку оцінюється за енергією, пов’язаною з кожним атомом при моделюванні

$$\mathbf{q} = \frac{d}{dt} \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i \varepsilon_i \tag{6}$$

де q - вектор потоку тепла, r_i - вектор положення атома *i*, а *i* - енергія, пов'язана з атомом і, а сума по всіх атомах N.

1.2.2.1 Теорія функціональності щільності розрахунків

Розрахунки ТФЩі (теорія функціональної щільності) при нульовій температурі виконувались за допомогою VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package,

Vienna, Austria)[21,22], плівково-хвильового псевдопотенційного програмного пакету. Були використані потенціали доповненої хвилі проектора (Проектор доповненої хвилі, ПДХ), що постачаються разом з VASP та апроксимацією градієнта для функціоналу обміну-кореляції. Напівядерні 3p / 4p / 5p електрони Cr, Fe, Mn, Mo, Nb, Ni, Os, Re, Ru, Ta та W явно трактуються як валентність. Метод спеціальної квазівіпадкової структури (СКС) був використаний для імітації невпорядкованих атомних структур для еквімолярних ВЕСів, як повідомляли раніше 125 і 160 атомів для квінарних ГЦК, ОЦК та ГЩУ (Гексагональні щасливо упаковані) ВЕСів відповідно. Для сплавів, що містять магнітні елементи Co, Cr, Fe, Mn або Ni, розглядали колінеарну спінову поляризацію (тобто, використовуючи феромагнітні та антиферомагнітні спінові конфігурації як початковий вхід). Інтеграції зони Бриллюена проводили, використовуючи сітки k-точок Монкхорста-Пака. Збіжність енергії щодо сітки k-точок становить близько 1-2 меВ / атом.

Відсічення енергії плоскої хвилі підтримувалось постійним при 500 еВ, 264 еВ та 322 еВ для CoCrFeNi, MoNbTaW та CoOsReRu, відповідно. Всі моделі СКС спочатку зазнали лише об'ємної релаксації (тобто, фіксуючи форму решітки та положення іонів), а потім повну релаксацію під нульовим тиском, поки збіжність енергії не досягла 1 меВ / атом. Для простоти в цьому дослідженні енергією нульової точки нехтували. Ентальпію пласта розраховували шляхом віднімання зважених за складом загальних енергій складових елементів у основному стані із загальної енергії сплаву.

Розрахунки гратчастих фононів проводились із використанням гармонічного наближення. Вібраційна ентропія ($S^{віб}$)розраховується за формулою:

$$S^{vib}(V,T) = 3k_B \int_0^{\infty} n^{vib} \lfloor (f_{BE}+1) ln(f_{BE}+1) - f_{BE} ln f_{BE} \rfloor \, d\varepsilon \qquad (7)$$

де n_{vib} - густина фононних станів (ЩС), а f_{BE} - функція розподілу Бозе-Ейнштейна.

Електронне збудження через рівень Фермі шляхом міграції електронів від валансної зони до зони провідності породжує електронну ентропію(S^{elec}), яка може бути визначена за формулою:

$$S^{elec}(V,T) = -2k_B \int_{-\infty}^{\infty} n^{elec}[f_{FD}\ln f_{FD} + (1 - f_{FD})\ln(1\text{-}f_{FD})]d\varepsilon \quad (8)$$

де n^{elec} - електронна густина станів, а f_{FD} - функція розподілу Фермі-Дірака.

1.2.2.2 Гібридне моделювання МК / МД

Для розрахунку конфігураційної ентропії використовують гібридний метод МК / МД. Моделювання проводиться шляхом чергування молекулярної динаміки при кожній температурі із замінами Монте-Карло, кожна виконана з перших принципів за допомогою VASP[18][19]. Канонічний ансамбль (тобто постійна кількість речовини, об'єм і температура) був прийнятий для структур ГЦК та ОЦК, а ізотермалізобаричний ансамбль (тобто постійна кількість речовини, тиску та температури) для структури ГЩУ. Для цих трьох сплавів було виконано мінімум 1000 кроків МК з часовими кроками МД 10 або 20 фс, в результаті чого загальний час моделювання МД перевищив 10 пп (псевдопотенціал). Детальніше про використовувані процедури подано в іншому місці[20]. Зменшення конфігураційної ентропії через хімічний порядок короткого діапазону можна обчислити, використовуючи попарне скорочення методу варіації кластеру Кікучі (МВК):

$$I = \sum_{i,j=1}^{N} y_{ij} ln\left(y_{ij}/c_i c_j\right) \quad (9)$$

де y_{ij} - співвідношення найближчих сусідів, а c_i та c_j - мольні частки елементів i та j відповідно.

1.2.2.3 Моделювання CALPHAD

Розрахунок фазових діаграм (CALPHAD) забезпечує альтернативний підхід до термодинамічного прогнозування. Заснований на інтерполяції емпіричних термодинамічних функцій, пристосованих до існуючих експериментальних даних або даних, отриманих на основі перших принципів, це потужний інструмент для прогнозування фазової діаграми. Однак його застосовність до ВЕСів залежить від наявності термодинамічних баз даних, які часто є неповними, або від комбінації існуючих баз даних, які є взаємно суперечливими. Обстежены існуючі бази даних

для ВЕСів та розглянута стратегія їх збільшення за допомогою даних, отриманих із перших принципів.

Розрахунки CALPHAD (CALculation of PHAse Diagrams, розрахунок фазових діаграм) проводяться із використанням термодинамічної бази даних TCNI8, наданої ThermoCalcTM. Ця база даних охоплює всі складові двійкові файли та обмежені тернари. Останні дослідження детально розробили базу даних та програми моделювання CALPHAD для ВЕСів.

Дійсність CALPHAD залежить від точності та повноти базової бази даних. Традиційні бази даних були структуровані навколо одного або декількох базових елементів, таких як алюміній, залізо або нікель, з додатковими легуючими елементами, призначеними для присутності в низьких концентраціях. Термодинамічні дані для інтерметалідних сполук у проміжних композиціях є рідкісними, і існуючі фази часто відсутні в базах даних, що вимагає ретельного коригування та оптимізації при дослідженні нової системи сплавів. Тим не менше, CALPHAD є безцінним інструментом для отримання якісного глобального уявлення про фазову діаграму, включаючи багато потенційних фаз, які можуть відбутися, і те, як впливає на вибір фази зміна температури та складу[17].

2 Методи дослідження

2.1 Використання програми Colaboratory ті розгляд її компонентів

Цей метод був детально розглянутий та опрацьований за допомогою программи для розрахунку Google Colaboiratory.

Colaboratory, або скорочено Colab – це продукт компанії Google Research. Colab дозволяє любому писати та виконувати виробничий код Python через браузер і особливо добре підходить для машинного навчання, аналізу даних та освіти. З технічної точки зору Colab - це розміщена на хості служба Jupyter для ноутбуків, яка не вимагає налаштування для використання, але при цьому надає безкоштовний доступ до вичисливих ресурсів, включаючи графічні процеси. Ресурси Colab не

гарантовані і не безмежні, а межі використання іноді коливаються. Це потрібно, щоб Colab могла безкоштовно надавати ресурси.

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

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, а 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 відсутняй, цикл редагування-тестування-налагодження неймовірно швидкий. Налаштувати Python просто: помилка або невірний ввід ніколи не визовує помилку сегментації. Щойно цього, коли інтерпретатор виявляє помилку, він виявляє вимкнення.

Підходи, я кі були використані, полягали у використанні eval та exec. eval () обробляє лише вирази, а exec - виробничий код.

Jupyter існує для розробки програмного забезпечення з відкритим вихідним кодом, відкритими стандартами та сервісами для інтерактивного обліку на десятках мовних програм програмування.

2.2 Практична частина

Для початку виконання роботи потрібно було підготовити матеріал. Матеріал був зібраний у вигляді базових компонентів з минулих робіт. Тобто бралися елементи та їх структурні властивості, а саме склад, теплопровідність, теплове розширення, теплова потужність, щільність, обсяг на атом кристалічної структури та заносились в програму excel.

1	,Composition,Thermal_conductivity,Thermal_expansion,heat_capacity,density,vpa
2	1,Bi4,0.00988102,6.08663e-05,12.4628,8.67484,40.003
3	2,Hg33Rb3,0.0115074,5.30453e-05,112.807,10.3692,30.586388888888887
4	3,Hg33K3,0.0118133,8.00767e-05,119.042,10.2956,30.181944444444444
5	4,Cs6Hg40,0.0137347,5.27106e-05,146.821,9.59412,33.18978260869565
6	5,Ag4O2,0.0174529,0.00011511,19.566,6.62411,19.364
7	6,He8Ne4,0.0423603,-3.17165e-06,35.9224,1.01028,15.441583333333334
8	7,Ca16Hg36,0.0749358,0.000156837,175.558,9.468,26.51846153846154
9	8,Cr1Te1,0.0806574,8.46574e-05,6.33362,4.68531,31.82565
10	9,Hg10Pd4,0.0851389,0.000145895,48.3764,13.6986,21.053357142857145

Рис.2.1 - Зображення сплавів та їх властивостей

Після цього ми беремо excel файл та відкриваємо в Colab. Програма розраховає подані їй дані та виводить графік у вигляді лінійної регресії.

Лінійна регресія – це такий лінійних підхід до моделюючого взаємоз'вязку між реакцияєю (скалярною та однією) або залежними та незалежними змінними (пояснювальними). Вона використовується, коли ми хочемо передбачити значення змінної на основі значення іншої змінної. Змінна, яку ми хочемо передбачити, називається залежною змінною (або інколи змінною результату).

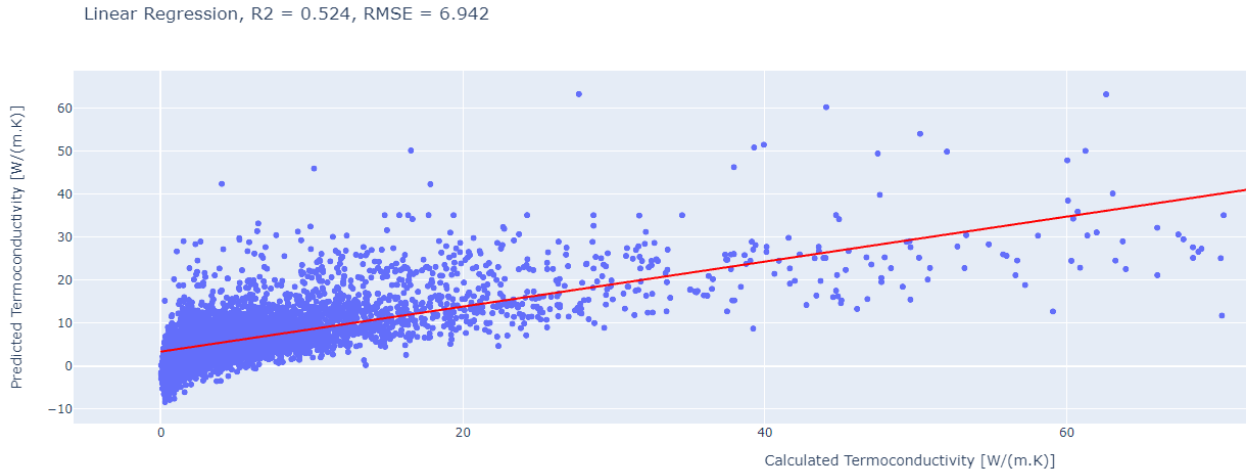

Рис.2.2 - зображена розрахункова теплопровідність. R2 – це наскільки томним вийшов результат в лінійній регресії(якщо значення буде наближатись до 1, тим точніше вийде результат і тим самим точки будуть ближче розташовати до лінії). RMSE – це середньоквадратична помилка.

Зрозуміло, що такі результати мене не влаштовують і потрібно було знайти рішення для більш точного розрахунку. Для цього був використаний градієнт підсилення регресора.

Підсилення градієнта - це техніка машинного навчання для проблем регресії та класифікації, яка створює модель прогнозування у вигляді ансамблю слабких моделей прогнозування, як правило, дерев рішень. Вона спирається на інтуїцію, що найкраща з можливих наступних моделей у поєднанні з попередніми моделями мінімізує загальну помилку прогнозування. Якщо невелика зміна прогнозу для випадку не спричиняє змін у помилці, тоді наступний цільовий результат справи дорівнює нулю.

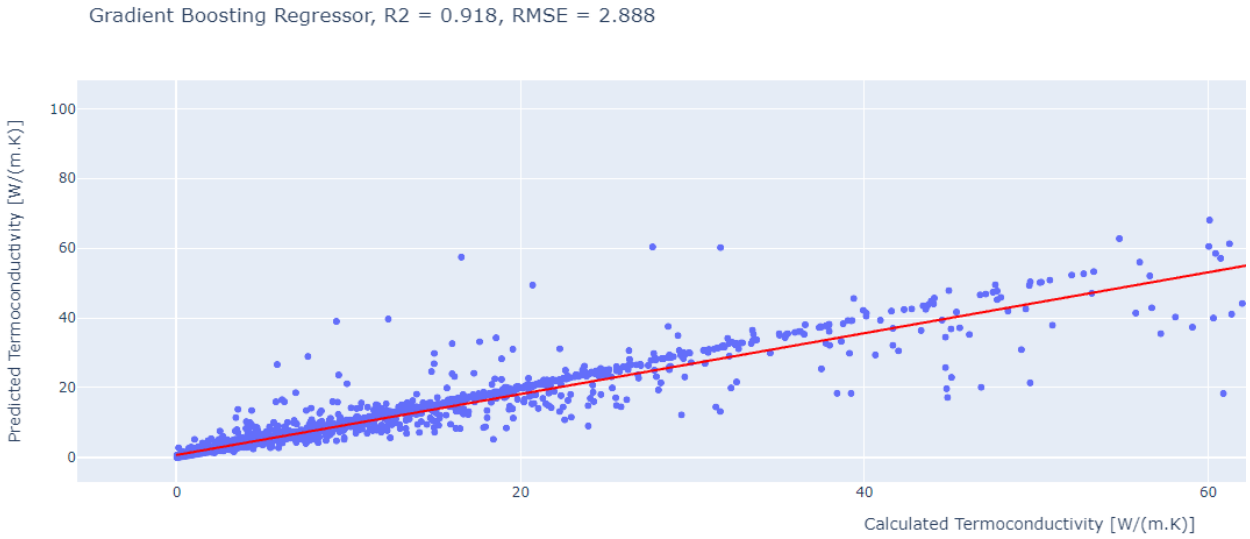

Рис.2.3 - зображена розрахункова теплопровідність за допомогою градієнта, що підсилює регресію.

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

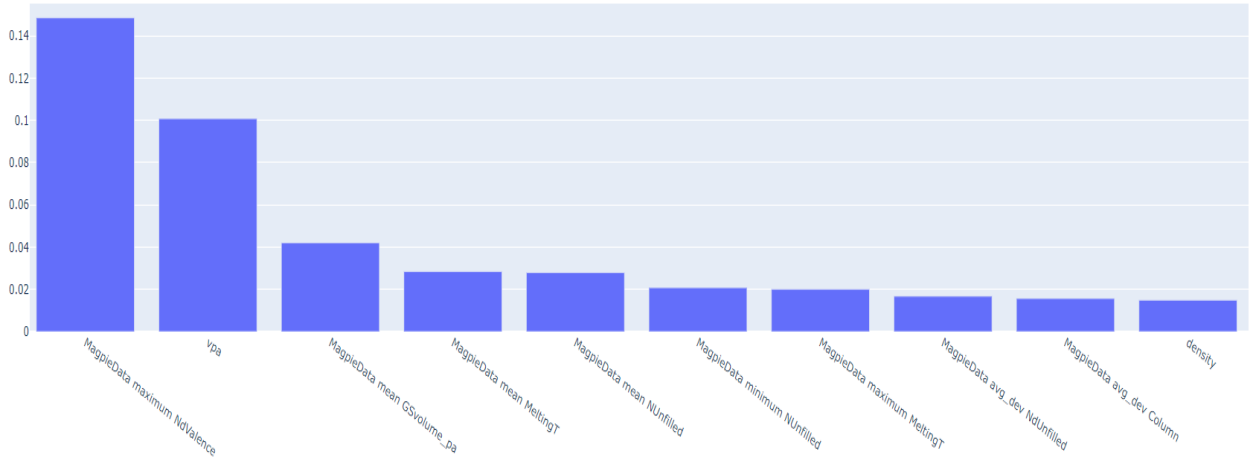

Рис. 2.4 - зображена діаграма з найбільшою кількістю використовуваних властивостей в компонентах сплавів. MagpieData maximum NdValence - це максимальна кількість заповнених валентних d орбіталей серед елементів у композиції, vpa - обсяг на атом кристалічної структури, MagpieData maximum GSvolume_pa - максимальний обчислений DFT (теорія функціональної щільності) об’єм елементарної твердої речовини серед елементів у складі, MagpieData mean MeltingT - середня температура плавлення серед елементів у складі, MagpieData mean NUnfilled - середня кількість незаповнених валентних орбіталей серед елементів, MagpieData minimum NUnfilled - мінімальна кількість незаповнених валентних орбіталей серед елементів, MagpieData maximum MeltingT - максимальна температура плавлення серед елементів у складі, MagpieData avg_dev NUnfilled - середнє відхилення незаповнених валентних орбіталей серед елементів, MagpieData avg_dev Column - це середнє відхилення в колонці періодичної системи серед елементів у складі, density - щільність, яка отримана від кристалічної структури.

3 Розрахункова частина

Основними результатами у нашій роботі – прогнозування параметрів сплавів. Так як наш алгоритм працює фактично основуючись на попередніх розрахунках схожих елементів та/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 відобрзити на графіку.

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

Після таких маніпуляцій з даними можна приступаємо до вивчення високоентропійних сплавів, а саме робимо такіж маніпуляції, як попердньому пункті (тна цей беремо високоентропійні сплави і проводимо такіж дії, але без графіків).

Программа аналізує дані та виводить нам всі структурні властивості. Завдяки цим властивостям ми можемо порівняти ці складові та представити їх у вигляді таблиці і точнового графіка.

,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
15,Ti15V15Cr20W25Hf25,11.22,17.14
16,Ti15V15Nb20Mo25Zr25,7.2,18.48
17,Ti15V15Nb20Mo25Ta25,9.87,17.26
18,Ti15V15Nb20Mo25W25,10.49,16.36
19,Ti15V15Nb20Mo25Hf25,9.16,18.48
20,Ti15V15Nb20Zr25Ta25,8.83,19.07
21,Ti15V15Nb20Zr25W25,9.37,18.1
22,Ti15V15Nb20Zr25Hf25,8.22,20.37
23,Ti15V15Nb20Ta25W25,12.24,16.9
24,Ti15V15Nb20Ta25Hf25,10.73,19.07
25,Ti15V15Nb20W25Hf25,11.37,18.1

Рис. 3.1 - властивості викосоентропйних сплавів

Ці дані були внесли в программу і згодом отримані результати у вигляді таблиці:

	Unnamed: 0	Composition	density	vpa	composition	MagpieData minimum Number	MagpieData maximum Number	MagpieData range Number	MagpieData mean Number	MagpieData avg_dev Number
0	1	Ti15V15Cr20Nb25Mo25	7.45	16.15	(Ti, V, Cr, Nb, Mo)	22.0	42.0	20.0	32.30	9.20
1	2	Ti15V15Cr20Nb25Zr25	6.62	17.88	(Ti, V, Cr, Nb, Zr)	22.0	41.0	19.0	31.80	8.70
2	3	Ti15V15Cr20Nb25Ta25	9.33	16.68	(Ti, V, Cr, Nb, Ta)	22.0	73.0	51.0	40.05	16.95
3	4	Ti15V15Cr20Nb25W25	9.92	15.80	(Ti, V, Cr, Nb, W)	22.0	74.0	52.0	40.30	17.20
4	5	Ti15V15Cr20Nb25Hf25	8.65	17.88	(Ti, V, Cr, Nb, Hf)	22.0	72.0	50.0	39.80	16.70

Рис. 3.2 – результат отриманих даних після обробки інфорації

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

	vpa	MagpieData maximum NdValence	MagpieData mean GSvolume_pa	Thermal_conductivity	omposition
0	16,15	5	15,1605	12,57907867	Ti15V15Cr20Nb25Mo25
1	17,88	5	17,03675	8,940372811	Ti15V15Cr20Nb25Zr25
2	16,68	5	15,768	9,238502994	Ti15V15Cr20Nb25Ta25
3	15,8	5	15,2505	9,748402922	Ti15V15Cr20Nb25W25
4	17,88	5	16,788	7,088230425	Ti15V15Cr20Nb25Hf25
5	17,5	5	16,41425	8,963810793	Ti15V15Cr20Mo25Zr25
6	16,33	5	15,1455	9,674570385	Ti15V15Cr20Mo25Ta25
7	15,46	5	14,628	10,22973924	Ti15V15Cr20Mo25W25
8	17,5	5	16,1655	9,107790293	Ti15V15Cr20Mo25Hf25
9	18,07	5	17,02175	5,53790922	Ti15V15Cr20Zr25Ta25
10	17,14	5	16,50425	4,310374536	Ti15V15Cr20Zr25W25
11	19,32	5	18,04175	3,230293484	Ti15V15Cr20Zr25Hf25
12	15,97	5	15,2355	7,217065298	Ti15V15Cr20Ta25W25
13	18,07	5	16,773	5,277657506	Ti15V15Cr20Ta25Hf25
14	17,14	5	16,2555	5,024705246	Ti15V15Cr20W25Hf25
15	18,48	5	17,81225	7,692883985	Ti15V15Nb20Mo25Zr25

Рис. 3.3 – отримані основні середньостатистичні властивості сплавів після детального аналізу.

3.1 Властивості сплавів за обсягом атомної кристалічної структури та теплопровідністю

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

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

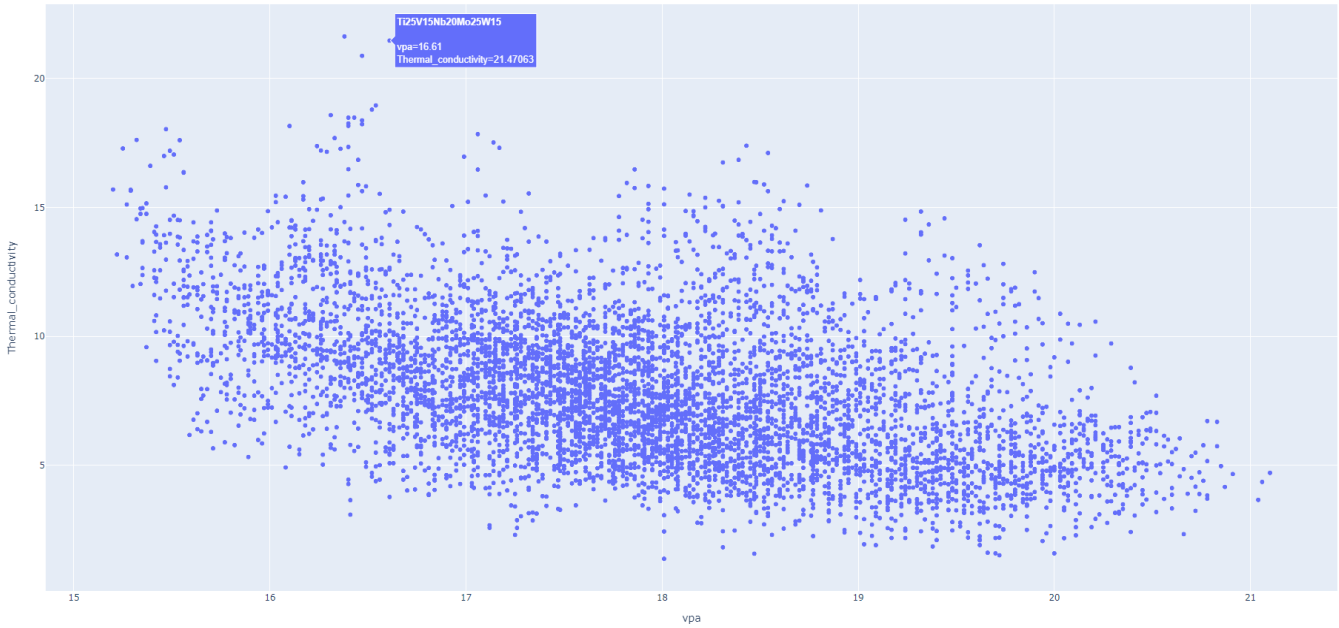

Рис. 3.1.1 – властивості сплаву за обсягом атомної кристалічної структури та теплопровідністю Ti25V15Nb20Mo25W15 (vpa = 16.61, Termal_Conductivity = 21.47063)

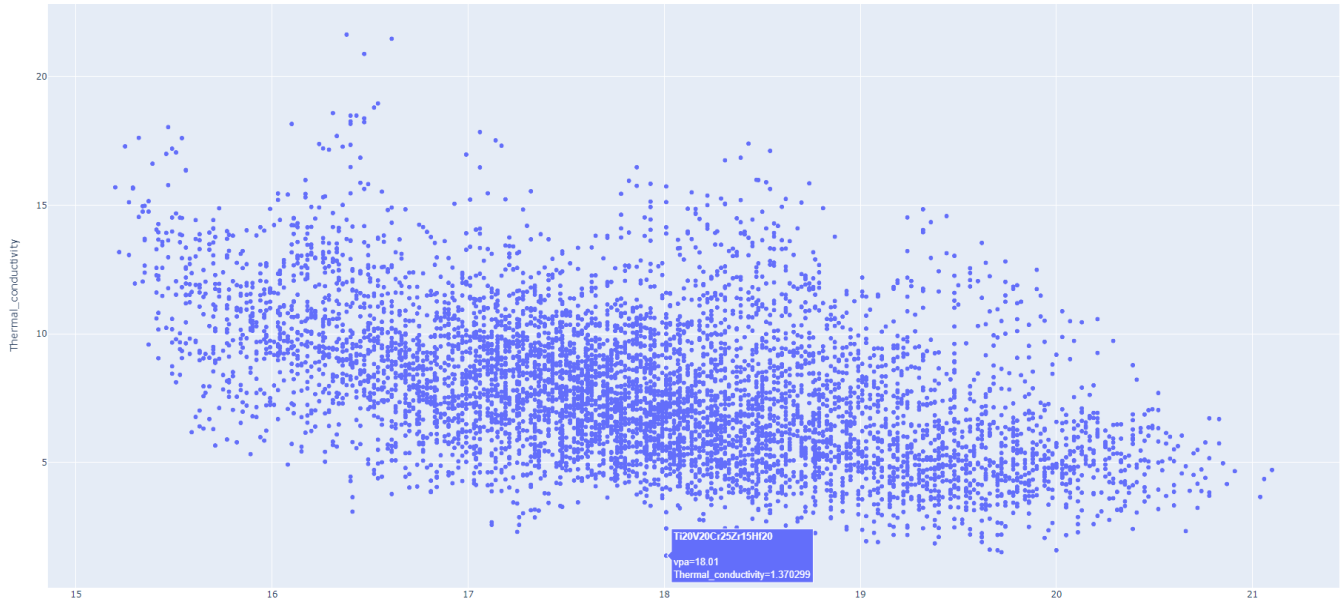

Рис. 3.1.2 – властивості сплаву за обсягом атомної кристалічної структури та теплопровідністю Ti20V15Cr25Zr15Hf20 (vpa = 18.01, Termal_Conductivity = 1,370)

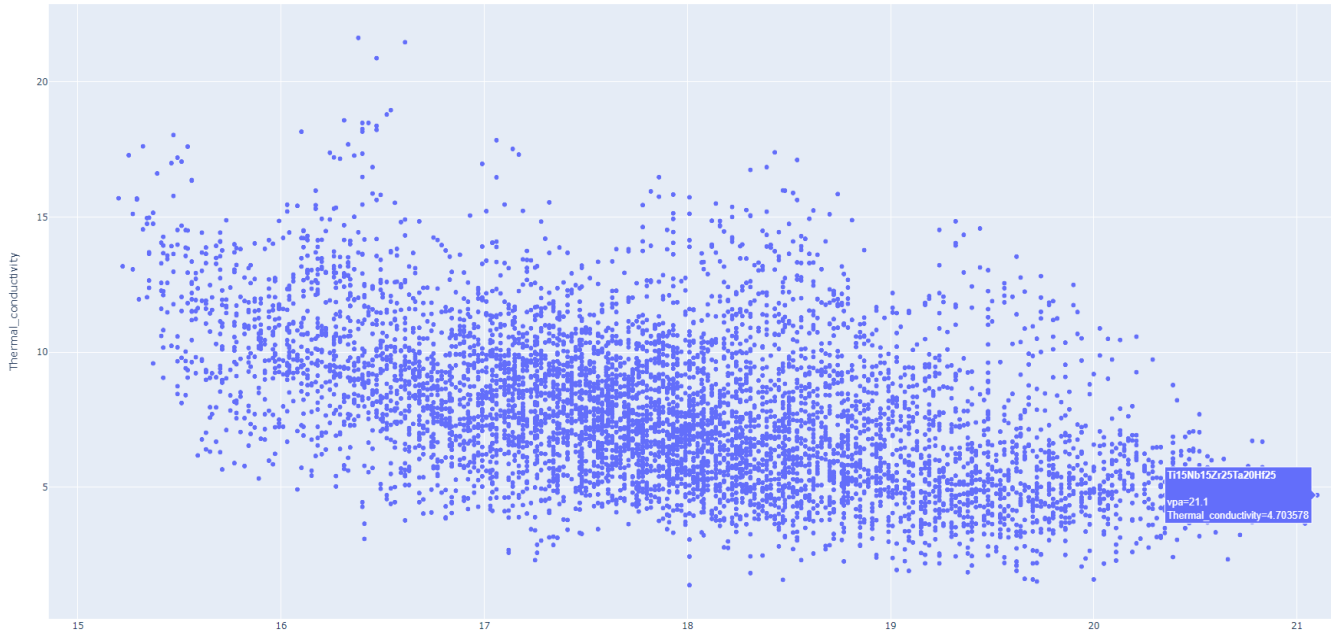

Рис. 3.1.3 - властивості сплаву за обсягом атомної кристалічної структури та теплопровідністю Ti15Nb15Zr25Ta20Hf25 (vpa = 21.1, Termal_Conductivity = 4,703)

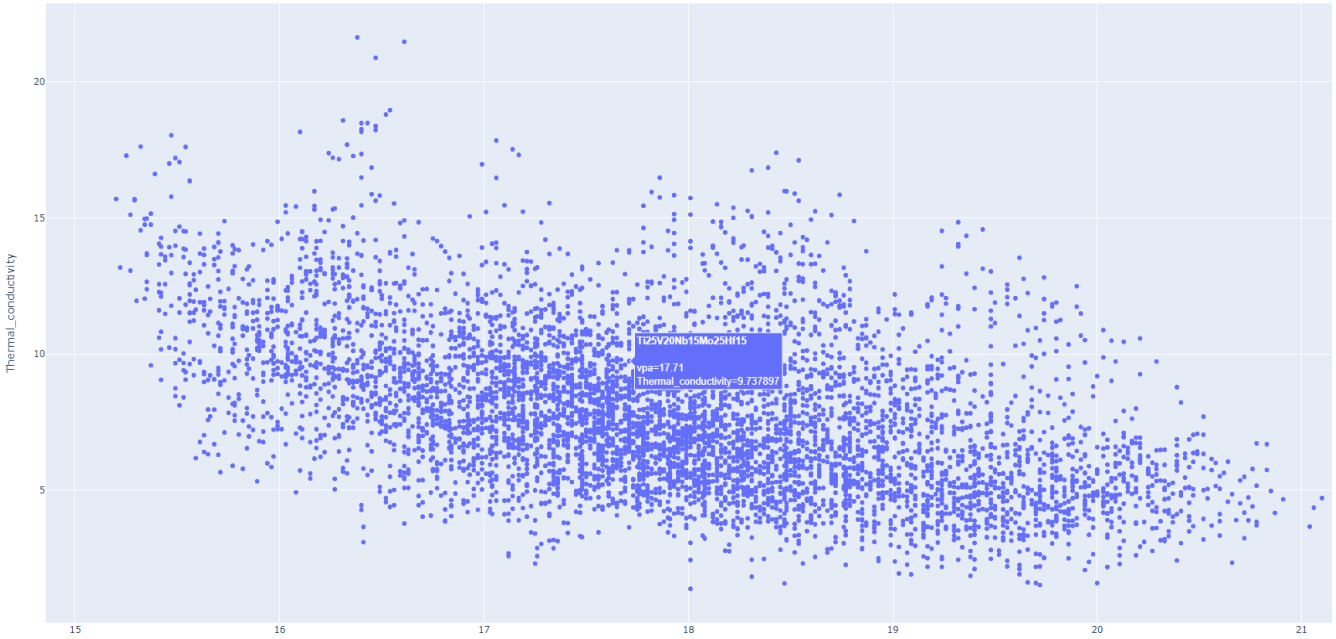

Рис. 3.1.4 – властивості сплаву за обсягом атомної кристалічної структури та теплопровідністю Ti25V20Nb15Mo25Hf15 (vpa = 17.71, Termal_Conductivity = 9.73)

З рисунку 3.1.1 можна зробити висновок, що вольфрам найтугоплавкіший з металів. Завдяки його високій теплопровідності він може конкурувати з деякими сплавами алюмінію.

Стосовно рисунку 3.1.2 та 3.1.3 висновком є те, що цирконій і гафній є дуже тугоплавкими металами. При температурі від 2016 К набуває інших властивостей, а саме гексагональна рішитка переходить в ОЦК решітку. Гафній завдяки своїм властивостям часто використовується в якості виготовлення стержней ядерних реакторів, спеціальних стекол та жаростійких материалів. Стосовно цирконію він дуже погано плавиться, а читий елемент дуже складно отримати. Саме тому для методами отримання цирконія через концентрати відносять є процеси хлоридні, лужні та фторидні.

3.2 Щільність сплавів та теплопровідність

Наступним пунктом було порівняння щільності твердих речовин серед елементів у складі з теплопровідністю.

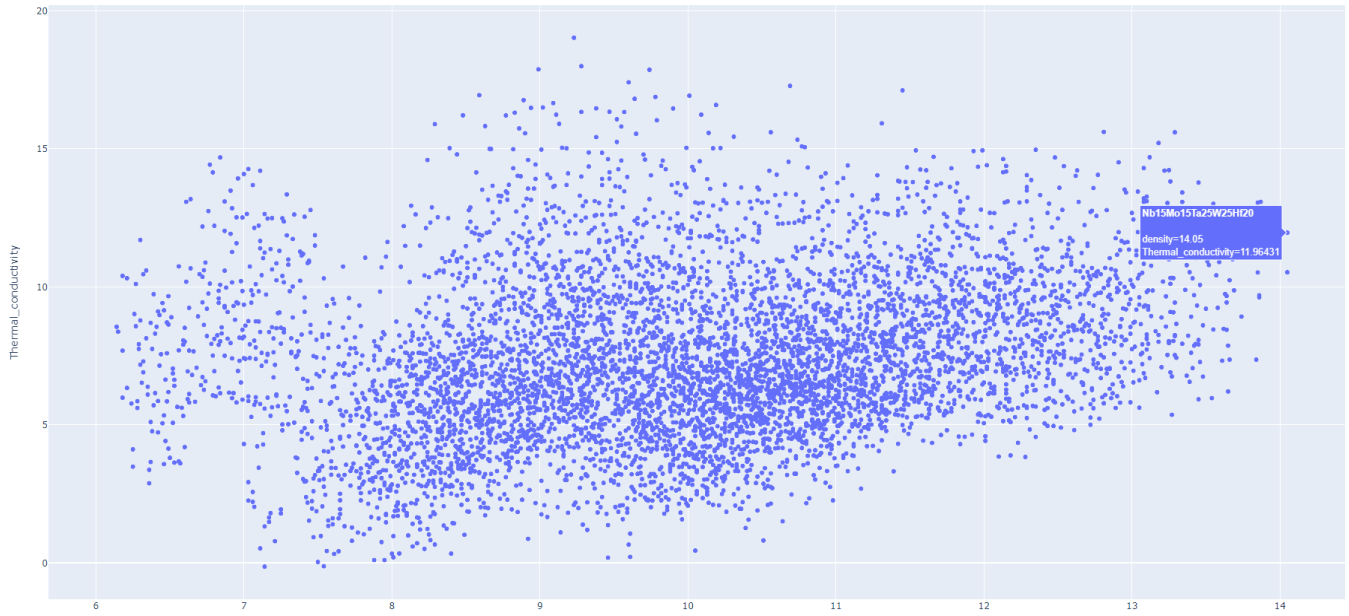

Рис. 3.2.1 – властивості сплаву за щільністю та теплопровідністю Nb15Mo15Ta25W25Hf20 (density = 14.65, Termal_Conductivity = 11.96)

Якщо розглядати рисунок 3.2.1 можна чітко сказати, що сплав NbMoTaW є дуже крихким при кішнатній температурі. Саме через це з таким сплавом дуже складно що зробити. Зазвичай для покращення властивостей такого слапу використовують легування для поліпшення механічних властивостей, або

добавляють елемент W (Вольфрам). Вольфрам являється одним з найщільніших металів. Саме через це сплав NbMoTaWHf набуває властивостей дуже щільного сплаву та добре проводить тепло.

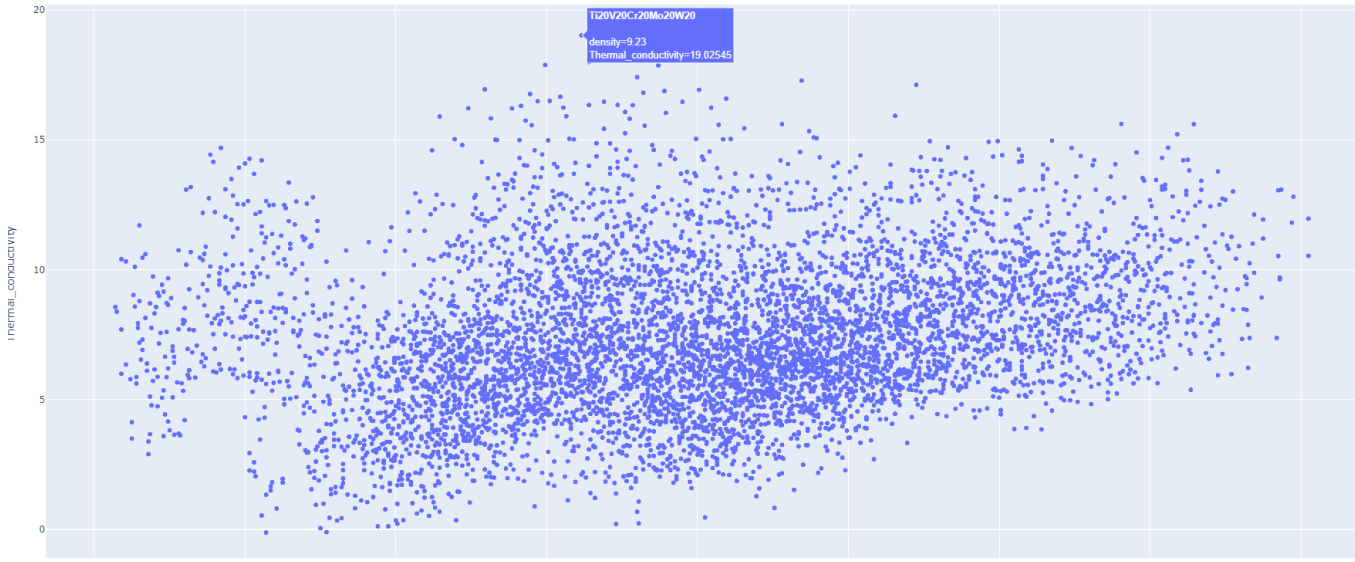

Рис. 3.2.2 – властивості сплаву за щільністю та теплопровідністю Ti20V20Nb20Mo20W20 (density = 9.23, Termal_Conductivity = 19.02)

Стосовно рисунку 3.2.2 можна чітко відповісти, що тугоплавкий високоентропійний сплав TiVNbMo є високоентропійним сплавом з хорошою пластичністю і високою міцністю. Для ракетобудування в сплав можуть добавити W (Вольфрам), щоб структура була не тільки міцною та пластинчатою, а ще дуже добре витримували високі тесператури.

ВИСНОВКИ

У цьому огляді були розшлянуті тагкі актуальні теми, а саме моделювання теплопровідності та їх ознаки. Це досить важливо, так як зазвичай у нових сплавів досить складно передбачити властивості, особливо при його синтезуванні. Було розглянуто питання,що таке високоентропійні сплави. Приведені приклади цих методів та їх ознаки. Вияснили, що таке теплопровідність та її методи.

Методом моделювання теплопровідності можна використовувати ефективний чисельний метод отримання теплопровідності сплавів, а метод моделювання загалом керовується даними та буде створювати моделі прогнозування цільових фізичних властивостей, що представляють інтерес, та класифікаційні моделі цільових класів властивостей.

Для дослідження були взяті сполуки які складаються з титану, ванадію, хрому, ніобію, танталу, вольфраму, цирконію, гафнію та інших. Це дозволило якісно розрахувати тернарні сполуки. За допомогою програми Colabory (python та jupyter) у роботі вийшло розрахувати такі параметри як теплопровідніть, теплоємніть, які сплави дуже добре витримують високі температури, мають високу щільність та інші властивості.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] Huang KH, Yeh JW. A study on multicomponent alloy systems containing equal-mole elements [M.S. thesis]. Hsinchu: National Tsing Hua University; 1996.

[2] Yeh JW, Chen SK, Lin SJ, Gan JY, Chin TS, Shun TT, Tsau CH, Chang SY. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. Adv Eng Mater. 2004;6:299–303.

[3] Yeh JW. Recent progress in high-entropy alloys. Ann Chim-Sci Mat. 2006;31:633–648.

[4] Tsai MH. Physical properties of high entropy alloys. Entropy. 2013;15:5338–5345.

[5] Yeh JW. Alloy design strategies on high-entropy alloys. JOM. 2013.

[6] Gaskell DR. Introduction to the thermodynamics of materials. 3rd ed. Washinton (DC): Taylor & Francis; 1995.

[7] Tong CJ, Chen MR, Chen SK, Yeh JW, Shun TT, Lin SJ, Chang SY. Mechanical performance of the AlxCoCrCuFeNi high-entropy alloy system with multiprincipal elements. Metall Mater Trans A. 2005;36:1303–1271.

[8] Tong CJ, Chen YL, Chen SK, Yeh JW, Shun TT, Tsau CH, Lin SJ, Chang SY. Microstructure characterization of AlxCoCrCuFeNi high-entropy alloy system with multiprincipal elements. Metall Mater Trans A. 2005;36:881–893.

[9] Li A, Zhang X. Thermodynamic analysis of the simple microstructure of AlCrFeNiCu high-entropy alloy with multi-principal elements. Acta Metallurgica Sinica (English Letters). 2009;22:219–224

[10] S. Riva, S. G. R. Brown, N. P. Lavery, and K. V. Yusenko, “Scandium-Based Hexagonal-Closed Packed Multi-Component Alloys,” *Phys. Met. Metallogr.*, vol. 119, no. 8, pp. 735–740, 2018, doi: 10.1134/S0031918X18080112.

[11] Tazuddin, N. P. Gurao, and K. Biswas, “In the quest of single phase multi-component multiprincipal high entropy alloys,” *J. Alloys Compd.*, vol. 697, pp. 434–442, 2017, doi: 10.1016/j.jallcom.2016.11.383.

[12] N.P. Gurao and Biswas Krishanu, In the quest of single phase multi-component multiprincipal high entropy alloys. J. Alloys Compd. 697, 434 (2017).

[13] Y. Zhao, H. Cui, M. Wang, Y. Zhao, X. Zhang, and C. Wang, “The microstructures and properties changes induced by Al:Co ratios of the Al CrCo FeNi high entropy alloys,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 733, no. March, pp. 153–163, Aug. 2018, doi: 10.1016/j.msea.2018.07.045.

[14] S.Guo M.Wang Z.Zhao Y.Y.Zhang X.Lin W.D.Huang "Journal of Alloys and Compounds" Volume 697, 15 March 2017, Pages 443-449, doi: 10.1016/2016.11.393

[15] Huang, J.-C. (2012), Evaluation of Tribological Behavior of Al-Co-Cr-Fe-Ni High Entropy Alloy Using Molecular Dynamics Simulation. Scanning, 34: 325-331. doi:10.1002/sca.21006

[16] E. D. Tabachnikova *et al.*, “Mechanical properties of the high-entropy alloy Al0.5CoCrCuFeNi 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.

[17] H. Kaufman and L. Bernstein: Computer Calculation of Phase Diagrams (Academic Press, New York, 1970).

[18] G. Kresse and J. Hafner: Ab initio molecular dynamics for liquid metals. Phys. Rev. B 47, 558 (1993).

[19] G. Kresse and J. Furthmüller: Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).

[20] M. Widom, W.P. Huhn, S. Maiti, and W. Steurer: Hybrid Monte Carlo/molecular dynamics simulation of a refractory metal high entropy alloy. Metall. Mater. Trans. A 45, 196 (2014).

[21] 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

[22] Roekeghem, A., Carrete, J., Oses, C., Curtarolo, S., & Mingo, N. (2016). High-throughput computation of thermal conductivity of high-temperature solid phases: The case of oxide and fluoride perovskites. *Physical Review X*, *6*(4), 1–10.

[23] 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.

[24] Ju, S., Shiga, T., Feng, L., Hou, Z., Tsuda, K., & Shiomi, J. (2017). Designing nanostructures for phonon transport via Bayesian optimization. Physical Review X, 7(2), 1–10.

[25] Seko, A., Togo, A., Hayashi, H., Tsuda, K., Chaput, L., & Tanaka, I. (2015). Prediction of Low-Thermal-Conductivity Compounds with First-Principles Anharmonic Lattice-Dynamics Calculations and Bayesian Optimization. *Physical Review Letters*, *115*(20), 1–5.

[25] Wei, H., Zhao, S., Rong, Q., & Bao, H. (2018). Predicting the effective thermal conductivities of composite materials and porous media by machine learning methods. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, *127*, 908–916.

[26] 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.