

Предсказание упругих свойств сплавов Гейслера с использованием машинного обучения

Научный руководитель – Соколовский Владимир Владимирович

Моисеев Данил Михайлович

Студент (магистр)

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

E-mail: danil174821@gmail.com

Традиционные методы оптимизации свойств материалов часто являются слишком трудозатратными. Поэтому в последнее время машинное обучение получило широкое применение в материаловедении.

Так, методы машинного обучения уже продемонстрировали эффективность в исследовании сплавов Гейслера [1]. Применение алгоритмов, таких как регрессия случайного леса, позволяет предсказывать параметры материалов, с минимальными затратами времени и ресурсов.

После обучения модели проверка предсказательной способности произведена путем сравнения предсказаний модели с данными расчетов из первых принципов по теории функционала плотности или же DFT [2]. Сравнение проведено на примере модуля объемной упругости B (рисунок 1).

Далее проведено сравнение предсказательной способности различных моделей машинного обучения в прогнозировании коэффициента Пуассона, а также произведены попытки по улучшению предсказаний.

Источники и литература

- 1) Jain, A. APL materials / A. Jain, et al. // Materials transactions. – 2013. – Т. 1. – №. 1. – С. 1-5.
- 2) Li G. et al. Theoretical investigations on elastic properties, phase stability, and magnetism in Ni 2 Mn-based all-d– metal Heusler compounds //Physical Review B. – 2023. – Т. 107. – №. 13. – С. 134440.

Иллюстрации

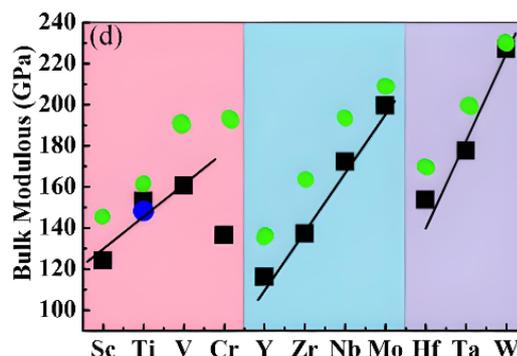


Рис. : 1 Сравнение предсказаний (зелёные точки) с DFT расчетами