

จิรประชา ธรรมพิริยานนท์ : การทำนายเฟสของโลหะผสมเอนโทรปีสูงโดยวิธีการเรียนรู้ของเครื่อง (PHASE PREDICTION OF HIGH ENTROPY ALLOYS VIA MACHINE LEARNING METHOD) อาจารย์ที่ปรึกษา: ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สงบ คำค้อ, 157 หน้า

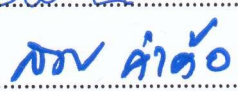
คำสำคัญ: โลหะผสมเอนโทรปีสูง/การเรียนรู้ของเครื่อง/การทำนายเฟส

โลหะผสมเอนโทรปีสูง (High entropy alloys) เป็นวัสดุชนิดใหม่ที่มีสมบัติเชิงกลที่โดดเด่น มีความเสถียรทางความร้อนและความต้านทานการกัดกร่อนที่ยอดเยี่ยม ทำให้เหมาะสมสำหรับการนำไปใช้งานในอุตสาหกรรมที่หลากหลาย อย่างไรก็ตาม โลหะผสมเอนโทรปีสูงมีองค์ประกอบที่ซับซ้อน ดังนั้นการทำนายโครงสร้างเฟสที่เกิดขึ้นจากการปรับแต่งสมบัติเพื่อให้เหมาะสมกับการใช้งานเฉพาะด้านจึงเป็นเรื่องที่ท้าทาย งานวิจัยนี้นำเสนอวิธีการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine learning) เพื่อสร้างแบบจำลองการทำนายโครงสร้างเฟสของโลหะผสมเอนโทรปีสูงโดยใช้ชุดข้อมูลที่ได้จากการทดลองร่วมกับคุณลักษณะ (Feature) ที่คำนวณจากองค์ประกอบทางเคมีของวัสดุในการฝึกแบบจำลอง งานวิจัยนี้ใช้เทคนิคการเข้ารหัสเวกเตอร์บูลีน (Boolean vector encoding) เพื่อแทนค่าการจำแนกเฟสแบบหลายเฟส ทำให้แบบจำลองสามารถจับความสัมพันธ์ที่ซับซ้อนของเฟสได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยได้นำอัลกอริทึม 4 แบบ ได้แก่ Support vector machine (SVM) k-nearest neighbors (KNN) Random forest (RF) และ Neural network (NN) มาใช้สร้างแบบจำลองสำหรับทำนายเฟสและทำการประเมินความแม่นยำในการทำนายจากการทดสอบกับชุดข้อมูลที่ไม่เคยนำมาใช้ในการฝึกมาก่อน ผลการศึกษาพบว่า NN และ KNN เป็นแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุดในการทำนายโครงสร้างเฟสโดยมีความแม่นยำที่ 84.85% นอกจากนี้การวิเคราะห์ความสำคัญของคุณลักษณะชี้ให้เห็นว่า ความเข้มข้นของอิเล็กตรอนชั้นนอกสุดและอุณหภูมิหลอมเหลวเป็นปัจจัยที่มีอิทธิพลต่อการเกิดเฟส งานวิจัยนี้แสดงให้เห็นถึงศักยภาพของนํ้าการเรียนรู้ของเครื่องมาใช้ในการด้านวัสดุศาสตร์เชิงคำนวณและเป็นแนวทางในการนำปัญญาประดิษฐ์มาใช้ออกแบบและพัฒนาโลหะผสมเอนโทรปีสูง

สาขาวิชา วิศวกรรมโลหการ

ปีการศึกษา 2567

ลายมือชื่อนักศึกษา.....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....

JIRAPRACHA THAMPIRIYANON : PHASE PREDICTION OF HIGH ENTROPY ALLOYS
VIA MACHINE LEARNING METHOD THESIS ADVISOR: ASSOC.PROF, SAKHOB
KHUMKOA, Ph.D., 157 PP.

Keyword: High entropy alloy/Machine learning/Phase prediction

High entropy alloys (HEAs) represent a novel category of materials known for their outstanding mechanical strength, thermal stability, and corrosion resistance, making them highly suitable for diverse industrial applications. However, their complex and variable compositions pose significant challenges in accurately predicting phase structures, which is essential for tailoring their properties to specific applications. This study presents a machine learning (ML) approach for phase structure prediction in HEAs, utilizing experimentally validated datasets with features derived from chemical compositions. A Boolean vector encoding technique was employed to effectively represent multi-phase classifications, enhancing the model's ability to capture complex phase relationships. Four ML algorithms including support vector machine (SVM), k-nearest neighbors (KNN), random forest (RF), and neural network (NN) were implemented and evaluated through rigorous cross-validation (CV) and testing on unseen data. The findings indicate that NN and KNN outperform other models, achieving a maximum test accuracy of 84.85%. Feature importance analysis highlights valence electron concentration (VEC) and melting temperature (T_m) as the most influential factors in phase formation. This research demonstrates the growing potential of ML-driven approaches in computational materials science and suggest promising pathways for integrating artificial intelligence to enhance HEA design and development.

School of Metallurgical Engineering

Academic Year 2024

Student's Signature.....

Advisor's Signature.....

