

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23. № 1. С. 66-72
Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2026; 1(23): 66-72

Научная статья
1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)
УДК 538.911
doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.007

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

**Виктория Сергеевна Панова¹, Ирина Алексеевна Панченко²,
Сергей Валерьевич Коновалов³, Екатерина Михайловна Запольская⁴**

^{1,2,3,4} Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия

¹ panova_vs@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0009-0000-1460-6677>

² i.r.i.ss@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1631-9644>

³ konovalov@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4809-8660>

⁴ vestnicsibgiu@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8098-5895>

Аннотация. В статье рассматривается применение нейронных сетей для прогнозирования свойств высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), которые характеризуются сложным химическим составом и многофазной структурой. Традиционные методы прогнозирования (феноменологические правила, CALPHAD и молекулярная динамика) часто требуют значительных вычислительных ресурсов и обладают ограниченной точностью. Предлагается использовать нейронные сети, способные выявлять сложные зависимости в данных, для решения этой задачи. Описана методология разработки модели, включая предобработку данных, архитектуру сети с полносвязными слоями и Dropout, а также процесс обучения и оценки. Результаты показывают высокую точность предсказаний, подтвержденную средней абсолютной ошибкой (MAE) для следующих свойств: микротвердость, модуль Юнга, предел текучести и прочности. Исследование демонстрирует потенциал нейронных сетей в ускорении разработки новых ВЭС с заданными свойствами и открывает перспективы для дальнейших исследований в материаловедении.

Ключевые слова: высокоэнтропийный сплав, нейронные сети, машинное обучение, многофазная структура, прогнозирование свойств материалов.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-00087-2401).

Для цитирования: Панова В.С., Панченко И.А., Коновалов С.В., Запольская Е.М. Прогнозирование свойств высокоэнтропийных сплавов с использованием нейронных сетей // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2026. Т. 23, № 1. С. 66-72. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.007.

Original article

PREDICTION OF PROPERTIES OF HIGH-ENTROPY ALLOYS USING NEURAL NETWORKS

Victoria S. Panova¹, Irina A. Panchenko², Sergey V. Kononov³, Ekaterina M. Zapolskaya⁴

^{1,2,3,4} Siberian State Industrial University, st. Kirova, 42, 654006, Novokuznetsk, Russia

¹ panova_vs@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0009-0000-1460-6677>

² i.r.i.ss@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1631-9644>

³ konovalov@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4809-8660>

⁴ vestnicsibgiu@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8098-5895>

Abstract. The article discusses the application of neural networks for predicting the properties of high-entropy alloys (HEAs) characterized by complex chemical composition and multiphase structure. Traditional prediction methods (phenomenological rules, CALPHAD, and molecular dynamics) often require significant computational resources and have limited accuracy. It is proposed to use neural networks capable of identifying complex dependen-

cies in data to solve this problem. The methodology for developing the model is described, including data preprocessing, network architecture with fully connected layers and Dropout, as well as the training and evaluation process. The results show high accuracy of predictions, confirmed by the mean absolute error (MAE) for the following properties: microhardness, Young's modulus, yield strength, and tensile strength. The study demonstrates the potential of neural networks in accelerating the development of new HEAs with desired properties and opens up prospects for further research in materials science.

Keywords: high-entropy alloy, neural networks, machine learning, multiphase structure, prediction of material properties.

Acknowledgements: The work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme № 075-00087-2401).

For citation: Panova V.S., Gostevskaya A.N., Panchenko I.A., Konovalov S.V., Zapolskaya E.M. (2026). Prediction of properties of high-entropy alloys using neural networks. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 66-72. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.007.

Введение

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) представляют собой особый класс материалов, содержащих пять или более основных элементов в примерно равных атомных долях. Эти сплавы характеризуются уникальными свойствами: высокая прочность, устойчивость к коррозии и термическая стабильность [1]. Исключительные свойства делают ВЭС перспективными для применения в различных отраслях промышленности, включая аэрокосмическую, автомобильную и энергетическую [2].

Однако прогнозирование свойств ВЭС остается трудной задачей из-за их сложного химического состава и многофазной структуры. Традиционные методы прогнозирования часто оказываются недостаточно точными и требуют значительных вычислительных ресурсов [1]. Для их анализа и прогнозирования часто используются компьютерное моделирование и квантово-химические расчеты, а также методы, основанные на термодинамических принципах и молекулярной динамике [3].

Нейронные сети, благодаря своей способности обучаться на больших объемах данных и выявлять сложные зависимости [4], представляют собой перспективный инструмент для решения рассматриваемой задачи.

Цель настоящей работы заключается в разработке и применении нейронной сети для прогнозирования свойств ВЭС. Представлен обзор существующих методов прогнозирования свойств ВЭС, описана методология разработки нейронной сети, а также приведены результаты экспериментов и их обсуждение. В заключение

рассматриваются возможные направления для будущих исследований.

Существующие методы прогнозирования свойств ВЭС включают феноменологические правила, расчет фазовых диаграмм (CALPHAD), методы машинного обучения и молекулярную динамику [5 – 7].

Феноменологические правила основаны на эмпирических данных и позволяют предсказывать фазовый состав и механические свойства ВЭС, однако они ограничены в точности и применимы только к известным системам [8].

Метод CALPHAD используется для моделирования фазовых равновесий в многокомпонентных системах и обеспечивает высокую точность, но требует значительных вычислительных ресурсов и точных термодинамических данных [1, 2].

Методы машинного обучения (регрессия, деревья решений и нейронные сети) способны обрабатывать большие объемы данных и выявлять сложные зависимости, требуют больших обучающих выборок и могут быть чувствительны к качеству данных [9 – 11].

Молекулярная динамика и *ab initio* расчеты используются для моделирования атомных взаимодействий и предсказания механических свойств на атомарном уровне, но они также требуют высоких вычислительных затрат и сложной настройки моделей [12].

Применение нейронных сетей в материаловедении включает прогнозирование механических свойств, оптимизацию состава сплавов и анализ микроструктуры [13 – 15]. Нейронные сети используются для прогнозирования прочности, твердости и пластичности материалов на основе их

химического состава и микроструктуры. Например, нейронные сети применяются для моделирования жаропрочности никелевых сплавов [16]. Они также помогают в оптимизации состава сплавов для достижения желаемых свойств, как в случае разработки новых полимерных композиционных материалов [17]. Кроме того, нейронные сети применяются для анализа изображений микроструктуры материалов и классификации фаз [18, 19], что способствует более точному определению структурных характеристик и углублению понимания их свойств. [20, 21].

Методика исследования

Нейронная сеть – это математическая модель (включая ее программную или аппаратную реализацию), созданная по принципам работы биологических нейронных сетей (системы взаимодействующих нервных клеток живого организма). Нейронные сети состоят из множества простых процессоров (нейронов), которые соединены между собой и взаимодействуют друг с другом. Каждый нейрон получает сигналы, обрабатывает их и передает результат другим нейронам через связи, называемые синапсами [4].

Основное преимущество нейронных сетей заключается в их способности обучаться на основе данных. В ходе этого процесса настраиваются веса связей между нейронами, что дает возможность выявлять сложные взаимосвязи в информации. Благодаря этому такие системы особенно эффективны для прогнозирования, где классические алгоритмы часто оказываются менее результативными [22].

Для прогнозирования свойств высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) использовали данные из различных источников, включая научные статьи, базы данных материалов и экспериментальные результаты. Типы данных включали химический состав сплавов и механические свойства (микротвердость, модуль Юнга, пределы текучести и прочности на растяжение). Объем данных составил около 1000 записей, что обеспечило достаточную выборку для обучения и тестирования модели.

Перед обучением нейронной сети данные были подвергнуты этапам предобработки: были удалены дубликаты и записи с некорректными значениями.

Для повышения производительности модели данные были стандартизированы с использованием следующей формулы:

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma}, \quad (1)$$

где x – исходное значение; μ – среднее значение; σ – среднее квадратическое отклонение.

Это позволило улучшить производительность модели за счет приведения данных к единому масштабу. После нормализации данные были разделены на обучающую и тестовую выборки в соотношении 80:20.

Архитектура модели включает несколько слоев. Входной слой представляет собой полносвязный слой с 256 нейронами и функцией активации ReLU. Математически выход этого слоя можно записать следующим образом:

$$h_1 = \text{ReLU}(W_1 \cdot X + b_1), \quad (2)$$

где W_1 и b_1 – веса и смещения первого слоя; X – входные данные.

Количество входных параметров соответствует количеству элементов в сплаве.

Далее следует слой Dropout, который с вероятностью 0,3 помогает предотвратить переобучение. Dropout случайным образом отключает нейроны во время обучения:

$$h'_1 = \text{Dropout}(h_1, 0.3). \quad (3)$$

Следующий скрытый слой также является полносвязным и содержит 128 нейронов с функцией активации ReLU:

$$h_2 = \text{ReLU}(W_2 \cdot X + b_2), \quad (4)$$

за которым следует еще один слой Dropout с вероятностью 0,3:

$$h'_2 = \text{Dropout}(h_2, 0.3). \quad (5)$$

Выходной слой представляет собой полносвязный слой с одним нейроном и линейной функцией активации, предназначенный для предсказания целевого значения:

$$\hat{y} = W_3 \cdot h'_2 + b_3, \quad (6)$$

где \hat{y} – все предсказанные значения.

Модель компилируется с использованием оптимизатора Adam и функции потерь mean_squared_error:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (7)$$

где y_i – истинное значение; n – количество образцов.

После завершения обучения модель оценивается на тестовой выборке, далее выводится средняя абсолютная ошибка (MAE):

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|. \quad (8)$$

Это позволяет оценить точность предсказаний модели.

Эти шаги обеспечили создание и обучение модели, способной точно прогнозировать свойства высокоэнтропийных сплавов на основе их химического состава.

Результаты и их обсуждение

Разработанная нейронная сеть продемонстрировала высокую точность в прогнозировании механических свойств высокоэнтропийных сплавов. На тестовой выборке средняя абсолютная ошибка для микротвердости составила 80,19 кгс/мм², для модуля Юнга – 8,62 ГПа, для предела текучести – 305,81 МПа, а для предела прочности – 470 МПа. Полученные значения свидетельствуют о хорошем соответствии предсказаний экспериментальным данным, особенно в случае модуля Юнга, где наблюдалась наименьшая погрешность. Анализ показал, что модель лучше справляется с прогнозированием линейных характеристик (модуль упругости), чем с нелинейными параметрами (предел прочности), что может быть связано с особенностями деформационных процессов в этих материалах.

При сравнении с традиционными методами было выявлено, что нейронная сеть превосходит CALPHAD-модели по точности прогноза микротвердости, где для последних характерны ошибки в диапазоне 120 – 150 кгс/мм² [23]. Кроме того, предложенный подход требует значительно меньше вычислительных ресурсов по сравнению с методами молекулярной дина-

мики, которые, несмотря на высокую точность на атомарном уровне, остаются чрезвычайно затратными [24, 25].

Оптимизация архитектуры сети, включающая использование двух скрытых слоев с 256 и 128 нейронами, функциями активации ReLU и слоями Dropout с вероятностью 0,3 позволила снизить переобучение. В результате потери на валидационной выборке уменьшились на 35 % по сравнению с однослойной моделью, а время обучения составило 120 эпох, что является приемлемым для задач материаловедения.

Анализ значимости входных параметров выявил, что наибольший вклад в прогноз вносят элементы с высокой энтропией смешения, такие как титан и ниобий, что согласуется с известными физическими закономерностями для высокоэнтропийных сплавов. Однако точность модели снижается для сплавов с повышенным содержанием кислорода, что указывает на необходимость расширения обучающей выборки для таких случаев.

Заключение

нейронных сетей для прогнозирования свойств высокоэнтропийных сплавов. Разработанная модель показала точность, сопоставимую или превышающую традиционные методы, при этом значительно выигрывая по скорости расчетов. Практическая значимость работы заключается в возможности ускорения разработки новых сплавов с заданными характеристиками, что особенно актуально для аэрокосмической и энергетической отраслей.

Перспективными направлениями дальнейших исследований являются расширение базы данных для включения редких элементов, а также тестирование более сложных архитектур, для обработки мультимодальных данных. Кроме того, интеграция термодинамических параметров и методов генеративного искусственного интеллекта может существенно повысить точность прогнозирования и открыть новые возможности для проектирования материалов с уникальными свойствами.

Результаты работы подчеркивают потенциал нейронных сетей в материаловедении и служат основой для дальнейшего развития методов машинного обучения в этой области. В будущем планируется более детальное изучение влияния состава и структуры на механические свойства, а также адаптация модели для работы

с другими классами многокомпонентных материалов.

Список литературы

1. Батаева З. Б., Руктуев А. А., Иванов И. В., Юргин А. Б., and Батаев И. А. Обзор исследований сплавов, разработанных на основе энтропийного подхода // *Обработка металлов: технология, оборудование, инструменты*. 2021. Т. 23. № 2. С. 116-146.
2. Юрченко Н. Ю., Панина Е. С., Салищев Г. А., and Степанов Н. Д. Разработка и исследование высокоэнтропийных сплавов на основе системы Al-Cr-Nb-Ti-V-Zr для высокотемпературных применений // *Физическая мезомеханика*. 2021. Т. 24, № 4. С. 16-27.
3. Ремпель А.А., Гельчинский Б.Р. Высокоэнтропийные сплавы: получение, свойства, практическое применение // *Известия высших учебных заведений. Черная металлургия*. 2020. №63. С. 248-253.
4. Лысцов Н.А., Мартышкин А.И. Нейронные сети: применение и перспективы // *Научное обозрение. Педагогические науки*. 2019. № 3–2. С. 35-38
5. Cadirci M. S., Cadirci M. Machine Learning Models for Accurately Predicting Properties of CsPbCl₃ Perovskite Quantum Dots arXiv // 2024. Vol.1. P. 2406.15515
6. Xiao-lan T., Si-wei S., Fang Ch., Xiu-juan Q., Yi W., Qing-hua Zh. Machine learning-guided property prediction of energetic materials: Recent advances, challenges, and perspectives. // *Energetic Materials Frontiers*. 2022. Vol. 3. I. 3. P. 177-186. <https://doi.org/10.1016/j.enmf.2022.07.005>.
7. Tengyuan Z., Fenglin S., Ling Xu. Review and comparison of machine learning methods in developing optimal models for predicting geotechnical properties with consideration of feature selection. / *Soils and Foundations*. 2024. Vol. 64, I. 6. P. 101523. <https://doi.org/10.1016/j.sandf.2024.101523>.
8. Полухин В.А., Эстемирова С.Х., Курбанова Э.Д., Белякова Р.М. Наноразмерные высокоэнтропийные материалы на основе ВЭС, принципы проектирования и методы синтеза. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2023. № 15. С. 520 – 535. <https://doi.org/10.26456/pcascnn/2023.15.520>.
9. Климова - Корсмик О.Г., Клименко Д.Н., Вережак М.В., and Жеребцов С.В. Прогнозирование пластичности высокоэнтропийных сплавов // *Прикладная математика & Физика*. Т. 54, № 4. С. 271-276. <https://doi.org/10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276>
10. Мирзоев А.А., Гельчинский Б.Р., Ремпель А.А. Нейросетевое прогнозирование межатомного взаимодействия в мультиэлементных веществах и высокоэнтропийных сплавах // *Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах*. 2022. Т. 504, № 1. С. 72-102 <https://doi.org/10.31857/S2686953522700066>.
11. Крюкова Я.Э., Кручинин И.И. Обзор способов применения методов машинного обучения для прогнозирования поведения пользователей. // *Международный студенческий научный вестник*. 2019. № 2. <https://eduherald.ru/ru/article/view?id=19596>
12. Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM potentials. Part 1: Potentials for single-component systems // *PNRPU Mechanics Bulletin*. 2017. №4. С. 214-237. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.4.14>.
13. Baskaran A., Kautz E., Chowdhary A., Ma W., Yener B., Lewis D. The Adoption of Image-Driven Machine Learning for Microstructure Characterization and Materials Design: A Perspective. // *JOM*. 2021. Vol. 73. No. 11. P. 3639–3657. <https://doi.org/10.1007/s11837-021-04805-9>.
14. Butler K. T., Davies D. W. Machine learning for molecular and materials science. // *Nature*. 2018. Vol. 559, No. 7715, P. 547–555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>.
15. Liu R., Kumar A. A predictive machine learning approach for microstructure optimization and materials design. // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5. Pp. 11551 – 11512, 2015. <https://doi.org/10.1038/srep11551>.
16. Н. И. Юсупова, О. С. Нургаянова, Р. А. Фаррахов Об организации архитектур и алгоритмов обучения нейронных сетей для прогнозирования жаропрочности многокомпонентных сплавов. // *Системная инженерия и информационные технологии*. – 2021. Т. 3, № 3(7). С. 37-44. https://doi.org/10.54708/26585014_2021_33737.
17. Колобков А. С., Гуляев И. Н. Разработка полимерных композиционных материалов с применением искусственного интеллекта // *Композитный мир*. 2021.
18. Suzuki A., Shiba Yu., Ibe H., Takata N., Kobashi M. Machine-learning assisted optimization of process parameters for controlling the microstructure in a laser powder bed fused WC/Co cemented carbide // *Additive Manufacturing*. 2022. Vol. 59. P. 103089. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103089>.
19. Rose D., Forth J., Henein H., Wolfe T., Qureshi A. J. Automated semantic segmentation of NiCrBSi-WC optical microscopy images using convolutional neural networks. // *Computational Materials Science*. 2022. Vol. 210. P. 11391. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111391>

20. Соболева, Н. Н. Применение нейронных сетей для анализа микроструктуры металла / Н. Н. Соболева // Уральская школа молодых металлургов = Ural School for Young Metal Scientists : Сборник статей XXII Международной научно-технической Уральской школы-семинара металлургов - молодых ученых, Екатеринбург, 23–27 октября 2023 года. – Екатеринбург: Издательский Дом «Ажур», 2023. – С. 407-411.

21. Клестов Р. А., Ключев А. В., Столбов В. Ю. Алгоритмическая устойчивость нейронных сетей глубокого обучения при распознавании микроструктуры материалов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. 2021. Т. 21, № 1. С. 159-166. <https://doi.org/10.14529/ctcr210114>.

22. Фаустова, К. И. Нейронные сети: применение сегодня и перспективы развития / К. И. Фаустова // Территория науки. – 2017. – № 4. – С. 83-87.

23. Guo, L., Gu, J., Gong, X. et al. CALPHAD aided design of high entropy alloy to achieve high strength via precipitate strengthening. / Science China Materials. 2020. Vol. 63, P. 288–299. <https://doi.org/10.1007/s40843-019-1170-7>

24. A. Ferrari, B. Dutta, K. Gubaev, Y. Ikeda, P. Srinivasan, B. Grabowski, F. Kormann. Frontiers in atomistic simulations of high entropy alloys. // Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 128, n0 15. P. 150901-1 – 150901-12. <https://doi.org/10.1063/5.0025310>

25. Xianglin Liu, Jiaxin Zhang, Zongrui Pei, Machine learning for high-entropy alloys: Progress, challenges and opportunities. // Progress in Materials Science. 2023. Vol. 131. P. 101018. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.101018>

Информация об авторах

В. С. Панова – младший научный сотрудник, Сибирский государственный индустриальный университет;

И. А. Панченко – к.т.н., доцент кафедры менеджмента качества и инноваций, заведующий научно-исследовательской лабораторией электронной микроскопии и обработки изображений, Сибирский государственный индустриальный университет;

С. В. Коновалов – д.т.н., профессор, проректор по научной и инновационной деятельности, Сибирский государственный индустриальный университет;

Е. М. Запольская – к.т.н., старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений, Сибирский государственный индустриальный университет.

References

1. Bataeva Z. B., Ruktuev A. A., Ivanov I. V., Yurgin A. B., and Bataev I. A. Review of studies of alloys developed based on the entropy approach // Metal processing: technology, equipment, tools. 2021. Vol. 23. No. 2. Pp. 116-146.

2. Yurchenko N. Yu., Panina E. S., Salishchev G. A., and Stepanov N. D. Development and study of high-entropy alloys based on the Al-Cr-Nb-Ti-V-Zr system for high-temperature applications // Physical mesomechanics. 2021. Vol. 24, No. 4. Pp. 16-27.

3. Rempel A. A., Gelchinsky B. R. High-entropy alloys: production, properties, practical application // News of higher educational institutions. Ferrous Metallurgy. 2020. No. 63. P. 248-253.

4. Lyscov N.A., Martyshkin A.I. Neural networks: application and prospects // Scientific review. Pedagogical sciences. 2019. No. 3–2. P. 35-38

5. Cadirci M. S., Cadirci M. Machine Learning Models for Accurately Predicting Properties of CsPbCl₃ Perovskite Quantum Dots arXiv // 2024. Vol. 1. P. 2406.15515

6. Xiao-lan T., Si-wei S., Fang Ch., Xiu-juan Q., Yi W., Qing-hua Zh. Machine learning-guided property prediction of energetic materials: Recent advances, challenges, and perspectives. // Energetic Materials Frontiers. 2022. Vol. 3. I. 3. P. 177-186. <https://doi.org/10.1016/j.enmf.2022.07.005>.

7. Tengyuan Z., Fenglin S., Ling Xu. Review and comparison of machine learning methods in optimal developing models for predicting geotechnical properties with consideration of feature selection. / Soils and Foundations. 2024. Vol. 64, I. 6. P. 101523.

<https://doi.org/10.1016/j.sandf.2024.101523>.

8. Polukhin V.A., Estemirova S.Kh., Kurbanova E.D., Belyakova R.M. Nanosized high-entropy materials based on HES, design principles and synthesis methods. // Physicochemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. 2023.No. 15. P. 520 – 535. <https://doi.org/10.26456/pcascnn/2023.15.520>.

9. Klimova - Korsmik O.G., Klimenko D.N., Verezhak M.V., and Zherebtsov S.V. Prediction of plasticity of high-entropy alloys // Applied Mathematics & Physics. Vol. 54, No. 4. P. 271-276. <https://doi.org/10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276>

10. Mirzoev A.A., Gelchinsky B.R., Rempel A.A. Neural network forecasting of interatomic interactions in multielement substances and high-entropy alloys // Reports of the Russian Academy of Sciences. Chemistry, Materials Science. 2022. Vol. 504, No. 1. P. 72-102 <https://doi.org/10.31857/S2686953522700066>.

11. Kryukova Ya.E., Kruchinin I.I. Review of methods for applying machine learning methods to predict user behavior. // *International Student Scientific Bulletin*. 2019. No. 2. <https://eduherald.ru/ru/article/view?id=19596>
12. Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM potentials. Part 1: Potentials for single-component systems // *PNRPU Mechanics Bulletin*. 2017. No. 4. pp. 214-237. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.4.14>.
13. Baskaran A., Kautz E., Chowdhary A., Ma W., Yener B., Lewis D. The Adoption of Image-Driven Machine Learning for Microstructure Characterization and Materials Design: A Perspective. // *JOM*. 2021. Vol. 73.No. 11. P. 3639–3657. <https://doi.org/10.1007/s11837-021-04805-9>.
14. Butler K. T., Davies D. W. Machine learning for molecular and materials science. // *Nature*. 2018. Vol. 559, No. 7715, pp. 547–555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>.
15. Liu R., Kumar A. A predictive machine learning approach for microstructure optimization and materials design. // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5.Pp. 11551 – 11512, 2015. <https://doi.org/10.1038/srep11551>.
16. N. I. Yusupova, O. S. Nurgayanova, R. A. Farrakhov On the organization of architectures and training algorithms for neural networks for predicting the heat resistance of multicomponent alloys. // *Systems Engineering and Information Technologies*. - 2021. Vol. 3, No. 3(7). P. 37-44. https://doi.org/10.54708/26585014_2021_33737.
17. Kolobkov A. S., Gulyaev I. N. Development of polymer composite materials using artificial intelligence // *Composite World*. 2021.
18. Suzuki A., Shiba Yu., Ibe H., Takata N., Kobashi M. Machine-learning assisted optimization of process parameters for controlling the microstructure in a laser powder bed fused WC/Co cemented carbide // *Additive Manufacturing*. 2022. Vol. 59. P. 103089. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103089>.
19. Rose D., Forth J., Henein H., Wolfe T., Qureshi A. J. Automated semantic segmentation of NiCrBSi-WC optical microscopy images using convolutional neural networks. // *Computational Materials Science*. 2022. Vol. 210. P. 11391. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.11391>
20. Soboleva, N. N. Application of neural networks for the analysis of metal microstructure / N. N. Soboleva // *Ural School for Young Metal Scientists: Collection of articles of the XXII International Scientific and Technical Ural School-Seminar of Metallurgists - Young Scientists*, Ekaterinburg, October 23-27, 2023. - Ekaterinburg: Publishing House "Azgur", 2023. - P. 407-411.
21. Klestov R. A., Klyuev A. V., Stolbov V. Yu. Algorithmic stability of deep learning neural networks in recognizing the microstructure of materials // *Bulletin of the South Ural State University. Series: Computer technologies, control, radio electronics*. 2021. Vol. 21, No. 1. Pp. 159-166. <https://doi.org/10.14529/ctcr210114>.
22. Faustova, K. I. Neural networks: application today and development prospects / K. I. Faustova // *Territory of science*. - 2017. - No. 4. - Pp. 83-87.
23. Guo, L., Gu, J., Gong, X. et al. CALPHAD aided design of high entropy alloy to achieve high strength via precipitate strengthening. / *Science China Materials*. 2020. Vol. 63, pp. 288–299. <https://doi.org/10.1007/s40843-019-1170-7>
24. A. Ferrari, B. Dutta, K. Gubaev, Y. Ikeda, P. Srinivasan, B. Grabowski, F. Kormann. Frontiers in atomistic simulations of high entropy alloys. // *Journal of Applied Physics*. 2020. Vol. 128, n0 15. P. 150901-1 – 150901-12. <https://doi.org/10.1063/5.0025310>
25. Xianglin Liu, Jiabin Zhang, Zongrui Pei, Machine learning for high-entropy alloys: Progress, challenges and opportunities. // *Progress in Materials Science*. 2023. Vol. 131. P. 101018. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.101018>

Information about the authors

V. S. Panova – Junior Researcher, Siberian State Industrial University;

I. A. Panchenko – Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Department of Quality Management and Innovation, Head of the Research Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing Siberian State Industrial University;

S. V. Konovalov – Dr. Sci. (Eng.), Professor, Vice-Rector for Research and Innovation, Siberian State Industrial University;

E. M. Zapolskaya –, Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, Research Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing, Siberian State Industrial University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 26.10.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 26 Oct. 2025; approved after reviewing 23 Feb.2026; accepted for publication 02 Mar.2026.