

Pre-processing of data is performed to represent them in the form of multidimensional matrices (tensors). Several types of neural networks were used for each data type.

The effectiveness of the use of the proposed models for the recognition of human actions on video by the share of the correct answers on the test sample and the time of training is investigated.

The best results in the proportion of correct answers were obtained for the MobileNetV1 pre-trained model. Also, good results were obtained using a fully connected neural network using the space-changing method. Among the classical machine learning algorithms, the best results on the test sample were obtained for logistic regression.

The models presented show a good result considering that there were 50 different types of human movements in the sample used.

Conclusion. *This paper describes the problem of human action recognition. Neural networks were used to solve this problem. Various approaches have been implemented to use neural networks to recognize human actions through video, and computational experiments have been conducted. Classical machine learning algorithms have been applied to classify joint motion in space.*

The study found that human action recognition from videos requires significant computing resources. Significant pre-processing is also required.

Considering that the best results were obtained for models that worked with joint coordinates in space, it can be concluded that it would be advisable to implement a model that will work with the video stream and automatically highlight the joint points on the body.

Keywords: *neural network, human action recognition from videos, transfer learning, space change method, classification.*

*Одержано редакцією 19.07.2019 р.
Прийнято до публікації 09.10.2019 р.*

УДК 538.9

DOI 10.31651/2076-5886-2019-2-72-86

PACS 07.05.Tr, 61.43.Bn, 64.60.De, 66.30.-h,
82.60.Lf

ПАСІЧНИЙ Микола Олександрович
кандидат фізико-математичних наук,
доцент, завідувач кафедри фізики,
Черкаський національний університет
імені Богдана Хмельницького
e-mail: pasichnyu@ukr.net
ORCID: 0000-0002-8434-1544

ДОСЛІДЖЕННЯ КРИВИХ ФАЗОВОЇ РІВНОВАГИ БІНАРНИХ ГЦК-СПЛАВІВ З ОБМЕЖЕНОЮ РОЗЧИННІСТЮ КОМПОНЕНТІВ РЕШІТКОВИМИ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

У роботі проведено дослідження кривих фазової рівноваги бінарних ГЦК-сплавів з обмеженою розчинністю компонентів на основі решіткових методів Монте-Карло. Підтверджено існування єдиної фазової діаграми модельної системи, що не залежить від конкретного дифузійного механізму та ймовірного алгоритму. Виявлено лінійні залежності різниці приведених температур кривих фазової рівноваги від концентрації для моделі регулярного твердого розчину та модельної бінарної системи на основі решіткових методів Монте-Карло.

Ключові слова: *Монте-Карло, бінарний сплав, регулярний твердий розчин, метод дифузійної пари.*

Вступ

Поява і стрибкоподібний розвиток ЕОМ став стимулом для удосконалення широкого класу чисельних методів для моделювання фізичних процесів. Обсяги оперативної пам'яті та швидкодія сучасної обчислювальних систем дають змогу

досліджувати на атомістичному рівні фізичні системи з кількістю атомів порядку 10^6 - 10^9 , чого цілком достатньо для моделювання наносистем та наноструктур.

Одним із популярних сьогодні є метод Монте-Карло, котрий знайшов своє застосування у багатьох галузях сучасної науки, як для розв'язування задач прикладного так і фундаментального характеру. Якщо не вдаватися до деталей, то будь який спосіб розв'язання конкретної задачі, що використовує випадкові величини, відноситься до класу методів Монте-Карло. Вперше метод Монте-Карло використали Нейман, Улам та Метрополіс при розгляді задачі про розповсюдження нейтронів. Термін „Монте-Карло” був запропонований Метрополісом у 1947 році для характеристики класу методів з використанням випадкових величин. Вперше термін „Монте-Карло” був використаний у статті Метрополіса і Улама 1949 року.

Загальною характеристикою даного класу методів є багаторазове застосування певної послідовності математичних та логічних операцій відповідно до імовірнісного алгоритму. Метод Монте-Карло є ефективним при дослідженні дифузійних процесів у твердих тілах. Його основу складає випадковий вибір дозволених траєкторій системи у фазовому просторі конфігурацій. Положення системи у фазовому просторі змінюється шляхом розігрування випадкового числа. У дифузійних задачах це досягається зміщенням атомів у реальному просторі при виконанні умов відповідно до конкретного ймовірнісного алгоритму. Метод Монте-Карло може бути використаний для широкого класу задач від знаходження інтегралів до моделювання кінетики фізичних процесів на атомістичному рівні [1-5]. На даний час залишаються нез'ясованими до кінця процеси нуклеації та конкуренції фаз на початкових етапах твердофазних реакцій. Дослідження даних процесів є актуальним для нанорозмірних систем, оскільки в таких системах, початкові етапи реакційної дифузії визначають характеристики всієї системи.

Мета статті. Метою роботи є дослідження кривих фазової рівноваги бінарних ГЦК-сплавів з обмеженою розчинністю компонентів решітковими методами Монте-Карло та аналіз результатів для різних дифузійних механізмів та ймовірнісних алгоритмів. Дослідження даного питання є актуальним не лише з наукової, а й з методологічної точки зору, оскільки Монте-Карло методи є досить розповсюдженим інструментом для моделювання кінетики дифузійних фазових перетворень на атомістичному рівні. Однак на сьогодні залишаються невисвітленими деякі ключові питання. Зокрема, при моделюванні кінетики дифузійних процесів вирішальним фактором є термодинамічний стимул перетворення, який визначається початковим станом системи відносно кривих фазової рівноваги на діаграмі стану модельної системи. Однак нез'ясованим залишається питання щодо ідентичності діаграм стану модельних систем при використанні різних дифузійних механізмів та ймовірнісних алгоритмів. Для реалізації мети було проведено серію комп'ютерних експериментів по дослідженню кривих фазової рівноваги бінарних ГЦК-сплавів з використанням обмінного та вакансійного механізмів для алгоритмів Метрополіса та Глаубера і вакансійного механізму для «Residence Time» алгоритму з подальшим їх порівнянням між собою та теоретичною моделлю регулярного твердого розчину.

Виклад основного матеріалу

1. Основи решіткових методів Монте-Карло

Клас Монте-Карло методів що базується на розгляді твердого тіла як системи атомів у вузлах певної жорсткої решітки і зміні положення атомів відповідно до певного імовірнісного алгоритму дістав назву решіткових методів Монте-Карло.

Суттєве обмеження даних методів полягає у використанні жорсткої решітки вузлів, в яких можуть знаходитися атоми. Дане обмеження робить можливим

визначити гамільтоніан системи у якому відсутній член з кінетичною енергією. У наближенні гамільтоніана Ізінга, енергію системи можна представити через суму парних енергій взаємодій атомів. Відповідно, можна знайти енергію системи і її зміну в результаті зміщення точки у фазовому просторі.

В залежності від умов задачі, обмежуються розглядом парних енергій взаємодії в межах певної координаційної сфери n , тоді, для енергетичного опису системи, необхідно задати набір параметрів: $E_{i,j}^1, E_{i,j}^2, \dots, E_{i,j}^n$. Верхній індекс вказує номер координаційної сфери в якій знаходиться один атом відносно іншого. Індекси i та j мають зміст при розгляді багатокомпонентної системи. Наприклад, для двокомпонентної системи і наближення другої координаційної сфери отримуємо набір із шести парних енергій взаємодії: $E_{A,A}^1, E_{A,B}^1, E_{B,B}^1, E_{A,A}^2, E_{A,B}^2, E_{B,B}^2$. Підбір параметрів парної енергії взаємодії для конкретної досліджуваної системи становить окрему термодинамічну задачу.

1.1. Механізми решіткових МК-методів

Певний час при моделюванні дифузійного руху досить широко був розповсюджений метод динаміки Кавасаки, у якому допускався безпосередній обмін двох сусідніх атомів з певною ймовірністю, що залежить від зміни повної енергії системи при такому обміні [6, 7]. В даній моделі немає необхідності розглядати сам механізм обміну. Спрощений алгоритм даного методу за обмінним механізмом можна представити наступною послідовністю подій: випадково обирається вузол модельної ґратки; випадково обирається один з його сусідів; обраховується зміна енергії системи в результаті їх обміну; обмін приймається або ні у відповідності до імовірнісного алгоритму (Рис. 1). Однак це не зовсім задовільна репрезентація кінетики дифузійного процесу, адже атоми можуть мігрувати по вузлам решітки лише за певним механізмом, наприклад вакансійним.

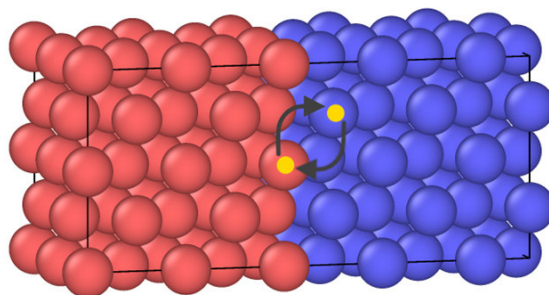


Рис. 1. Схема обмінного механізму для ГЦК структури.

Також для МК-моделювання досить широко використовується метод вакансійної динаміки [8-10]. Для реалізації цього механізму в модельну решітку вводиться вакансія, котра представляє собою відсутність атома у певному вузлі. Даний механізм відмінний від механізму Кавасаки тим, що лише атоми котрі знаходяться біля вакантного вузла можуть здійснити стрибок (помінятися місцями з вакансією). За даним механізмом можуть бути реалізовані стрибки вакансії як в першу так і в наступні координаційні сфери, однак відповідь на питання щодо розподілу ймовірностей таких стрибків є неоднозначною.

Зрозуміло, що наведені вище механізми доцільно використовувати для модельних систем у котрих вузли повністю заповнені атомами (за виключенням вакансій). Однак, їх використання не доцільне при моделюванні систем у яких значна частина вузлів решітки не зайнята атомами. До них можна віднести моделювання процесів напилення, поверхневої дифузії, еволюції пор на атомістичному рівні та ін. Для моделювання даного класу явищ доцільно використовувати модифікацію вакансійного механізму,

коли атом може змінити своє положення лише у випадку наявності вільного вузла. В залежності від конкретної задачі можуть бути різні реалізації з можливістю стрибків атомів як у першу так і в наступні координаційні сфери. Необхідно наголосити, що відмінність даного методу від вакансійного дещо умовна. В обох випадках зміщуються лише атоми і лише у вакантні вузли. Для вакансійного механізму ми можемо вважати рухомим об'єктом вакансію, тоді як для даного методу рухомими об'єктами є самі ж атоми. Перераховані механізми не вичерпують всіх можливих варіантів динаміки системи, адже кінетика системи (траєкторія точки у фазовому просторі) визначається імовірнісним алгоритмом.

1.2. Алгоритм Метрополіса

Згідно алгоритму Метрополіса, котрий був запропонований у 1953 році, ймовірність зміни стану системи, а у випадку решіткового методу Монте-Карло – ймовірність стрибка атома з положення i в положення j (або двох обміну атомів місцями), визначається наступною залежністю [11, 12]:

$$p_{i \rightarrow j} = \begin{cases} 1, & (\Delta E \leq 0); \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), & (\Delta E > 0). \end{cases} \quad (1)$$

де $\Delta E = E_j - E_i$, E_i та E_j – енергії системи до та після зміни стану відповідно, k – стала Больцмана, T – температура системи.

Очевидно, що зміни стану котрі приводять до зменшення енергії системи однозначно приймаються, якщо ж зміна енергія додатна, то ймовірність визначається експоненційною залежністю. Даний алгоритм є коректним при знаходженні рівноважного стану системи, однак не враховуються енергетичні бар'єри котрі долає система у процесі еволюції. Тому його застосування при дослідженні кінетики процесів не є достатньо обґрунтованим.

1.3. Алгоритм Глаубера

Згідно алгоритму Глаубера, ймовірність для атома здійснити стрибок з положення i в положення j визначається залежністю [13]:

$$p_{i \rightarrow j} = \frac{\exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}. \quad (2)$$

Як і в алгоритмі Метрополіса, ймовірність залежить лише від зміни енергії системи. Однак даний метод, у комбінації з вакансійним механізмом, широко використовується для моделювання кінетики процесів. Так, наприклад, авторами [14, 15], на основі алгоритму Глаубера, досліджено кінетику релаксації параметру порядку високовпорядкованих бінарних систем. Паралельно проведені резистометричні дослідження підтверджують результати отримані в МК-експериментах.

1.4. Residence-Time Algorithm

Відмінність даного алгоритму від двох попередніх полягає у тому, що розглядаються ймовірності для кожної можливої зміни стану системи і виключається можливість системи залишитися в попередньому стані [16-20]. Застосування Residence-Time алгоритму до решіткового методу Монте-Карло є доцільним для вакансійного механізму. Адже у цьому випадку ми маємо обмежену кількість атомів, що мають змогу здійснити стрибок. Згідно даного алгоритму, ймовірність атома у вузлі i обмінятися місцями з вакансією у вузлі j визначається наступним виразом:

$$P_{i \rightarrow j} = \frac{v_{0i} \exp\left(-\frac{Q_{i \rightarrow j}}{kT}\right)}{\sum_{k=1}^{nn} v_{0k} \exp\left(-\frac{Q_{k \rightarrow j}}{kT}\right)}, \quad (3)$$

де v_{0i} – частота спроб здійснити стрибок (може бути різною для різних типів атомів), $Q_{i \rightarrow j}$ – енергія міграції атома з вузла i у вузол j , nn – кількість атомів, що мають змогу стрибнути. Сумування у знаменнику (3) проводиться по атомам, сусіднім до вакансії, у межах визначеної конкретною моделлю координаційної сфери.

Відповідно до алгоритму, вакансія здійснює стрибок на кожному МК-кроці. Очевидно, що це приводить до нерівномірності часу, тому проміжок часу за який відбувається зміна стану системи на даному МК-кроці визначається наступним виразом:

$$\Delta t = \frac{1}{\sum_{k=1}^{nn} v_{0k} \exp\left(-\frac{Q_{k \rightarrow j}}{kT}\right)}. \quad (4)$$

Визначення енергій міграції атомів $Q_{i \rightarrow j}$ становить окрему задачу, адже зрозуміло, що дана величина характеризує енергетичний бар'єр, котрий потрібно подолати системі. Існує широкий клас першопринципних методів що дозволяють оцінити енергії міграції атомів [21-23]. В такій реалізації даного алгоритму необхідно мати повний набір величин $Q_{i \rightarrow j}$ для можливих стрибків вакансії при всіх конфігураціях оточення. Для розв'язання цієї проблеми користуються певними наближеннями, згідно яких $Q_{i \rightarrow j}$ визначається зміною енергії системи у результаті зміни стану та певними енергетичними параметрами. Як приклад, для активаційної енергії міграції можна використовувати наближення (Рис. 2):

$$Q = \Delta E / 2 + E_0,$$

де ΔE – зміна енергії системи; $E_0 = \text{const}$ – параметр моделі, що характеризує середню висоту бар'єра модельної системи.

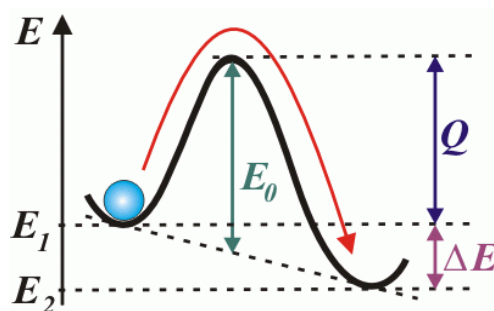


Рис. 2. Енергетичний профіль зміни стану системи, E_1 і E_2 – енергії системи до і після зміни стану.

За даної модифікації енергії міграції, ймовірність стрибка вакансії в i -му напрямі визначається залежністю:

$$p_i = f_i \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{2kT}\right) / \sum_{j=1}^6 f_j \exp\left(-\frac{\Delta E_j}{2kT}\right), \quad (5)$$

де $f_i = v_{0i}/v_{0B}$ – характеризує відношення між рухливостями компонентів.

1.5. Граничні умови та поверхні розділу

Для моделювання решітковими методами Монте-Карло використовується жорстка решітка у вузлах якої знаходяться атоми, тобто ідеального решітка. Оскільки модельна система має скінченні розміри, необхідно певним чином обрати граничні умови адекватні до поставленої задачі.

При дослідженні об'ємних властивостей твердих тіл, коли необхідно виключити вплив поверхневих ефектів, використовують періодичні умови Борна-Кармана. Застосування періодичних умов можна інтерпретувати як доповнення системи самою ж собою методом паралельного перенесення. Дані граничні умови забезпечують замкнутість і перетворюють модельну систему у нескінченну.

Однак існує цілий ряд задач в яких необхідно враховувати скінченність системи. У таких випадках граничні умови можуть задаватися різними способами. Наприклад, для моделювання утворення і руху нанопор при електроміграції [24], граничні атоми діелектрика фіксуються нерухомо у вузлах решітки. Для моделювання процесу наплення [25, 26], по двох осях, паралельних підложці, задаються періодичні граничні умови, граничні атоми підложки фіксуються як нерухомі, а поверхня на яку проводиться наплення вважається вільною, тобто атоми межують з частиною незайнятих вузлів, котрі заповнюються в процесі моделювання за рахунок наплення та поверхневої дифузії.

Більшість реальних систем це полікристали – мають у своїй структурі границі (границі зерен, міжфазні границі, границі двійників). Моделювання таких систем ускладнене використанням єдиної решітки вузлів для всього зразка. Дана проблема може бути розв'язана декількома способами: 1) Поняття границі вводиться шляхом приписування атомів до певного зерна. В такому наближенні границя представляє собою уявну поверхню розділу між атомами що належать різним зернам. Додатково вводиться енергія парної взаємодії для атомів різних зерен [24-26]; 2) Границі вводяться шляхом визначення послідовності атомів, котрі представляють границю. При цьому для атомів границі вводиться додаткова енергія і підвищується їх рухливість для забезпечення переваги дифузії по границям у порівнянні з об'ємною [27]; 3) Модельний зразок представляє собою полікристал, зерна якого мають різну орієнтацію [28], тобто для кожного зерна вводиться своя жорстка решітка з певною орієнтацією.

1.6. Застосування решіткових МК-методів до моделювання дифузійних процесів на атомістичному рівні

Моделювання процесів реакційної дифузії атомістичними МК-методами дає змогу проаналізувати початкові стадії даного процесу – нуклеацію нової фази та кінетику морфології дифузійної зони. Складність застосування МК-методів для моделювання даного класу явищ полягає у появі міжфазних границь, котрі, фізично, мають певну поверхневу енергію. Наступна проблема це опис термодинаміки нової фази, адже зрозуміло, поява нової фази викликана енергетичною вигідністю. Одними із перших робіт по моделювання початкових етапів реакційної дифузії МК-методами можна вважати [29-31]. Авторами даних робіт був розроблений новий підхід для моделювання двофазних систем. Основа запропонованого методу полягає у введенні різних енергій парної взаємодії для впорядкованої фази та розчину. На основі „Residence-Time” алгоритму для вакансійного механізму було встановлено існування двостадійного росту фази в мультишарах. Підтверджено гіпотезу про відповідність першої стадії реакції латеральному розростанню острівків нової фази, другої стадії –

нормальному росту. У роботах [32, 33] розроблено Монте-Карло модель в основу якої покладено можливість існування в дифузійній зоні двох проміжних фаз. Особливість запропонованої моделі полягає у різкій залежності парних потенціалів взаємодії від оточення. Для випадку двох проміжних фаз – введено чотири типи потенціалів: 1) для материнської фази (чистий А і чистий В, включно); 2) для проміжної фази типу А1В2; 3) для проміжної фази типу А2В1; 4) для атомів котрі належать різним фазам (аналог поверхневої енергії).

2. Методика експерименту

Для визначення рівноважних концентрацій бінарної системи з обмеженою розчинністю компонентів використовувався метод дифузійної пари. Суть даного методу полягає в тому, що модельна система задається у вигляді дифузійної пари, одна частина якої заповнена атомами сорту А, а інша половина атомами сорту В. У результаті моделювання кінетики дифузійних процесів за Монте-Карло алгоритмом відбувається релаксація системи до рівноваги, що відповідає контакту двох бінарних твердих розчинів на основі компонентів А (Alfa) та В (Beta) відповідно (Рис. 3). Даний метод був використаний авторами [34] для визначення точок кривої рівноваги діаграми стану модельної системи і отримано значну відмінність їх значень від моделі регулярного твердого розчину.

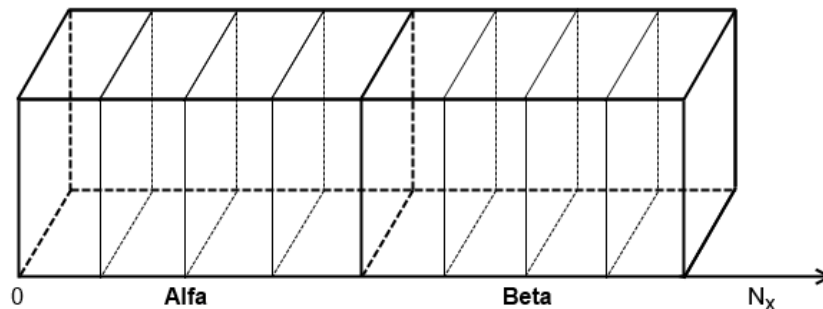


Рис. 3. Схема методу дифузійної пари.

У якості модельної системи для дослідження використано тривимірну ґратку з гранецентрованою кубічною решіткою (ГЦК) розміром 50x20x20 вузлів заповнених атомами двох сортів. Початково частина системи заповнювалася атомами одного сорту, інша – атомами другого сорту, створюючи таким чином дифузійну пару А-В. Для ГЦК решітки кожен вузол має $z = 12$ найближчих сусідів. При моделюванні використано наближення першої координаційної сфери для визначення енергії системи та можливості обміну. У якості граничних умов використано періодичні граничні умови Борна-Кармана по всім трьом осям.

Основним термодинамічним параметром модельної системи є приведена енергія змішування:

$$V = \frac{E_{mix}}{kT} = \frac{E_{AB} - \frac{E_{AA} + E_{BB}}{2}}{kT}. \quad (6)$$

3. Результати комп'ютерного експерименту

За результатами серії комп'ютерних експериментів встановлено рівноважний склад фаз C_{alfa} і C_{beta} при їх контакті для різних значень приведеної енергії змішування бінарної системи. Дослідження проводилися із використанням різних дифузійних механізмів та ймовірнісних алгоритмів. Результати представлені у таблицях 1-5:

- Таблиця 1 – Обмінний механізм за алгоритмом Метрополіса;
- Таблиця 2 – Обмінний механізм за алгоритмом Глаубера;

- Таблиця 3 – Вакансійний механізм за алгоритмом Метрополіса;
- Таблиця 4 – Вакансійний механізм за алгоритмом Глаубера;
- Таблиця 5 - Вакансійний механізм за Residence Time Algorithm.

Таблиця 1.
Обмінний механізм за алгоритмом Метрополіса.

| E_{mix}/kT | C_{alfa} | C_{beta} | kT/E_{mix} |
|--------------|-------------|-------------|--------------|
| 0,208 | 0,680011475 | 0,313967558 | 4,807692308 |
| 0,21 | 0,724345042 | 0,27321015 | 4,761904762 |
| 0,215 | 0,785609733 | 0,213038417 | 4,651162791 |
| 0,22 | 0,819313742 | 0,1817348 | 4,545454545 |
| 0,23 | 0,861066642 | 0,137791333 | 4,347826087 |
| 0,25 | 0,909325492 | 0,089480017 | 4 |
| 0,3 | 0,962094142 | 0,038059896 | 3,333333333 |
| 0,4 | 0,990804442 | 0,009428488 | 2,5 |

Таблиця 2.
Обмінний механізм за алгоритмом Глаубера.

| E_{mix}/kT | C_{alfa} | C_{beta} | kT/E_{mix} |
|--------------|-------------|-------------|--------------|
| 0,208 | 0,697516692 | 0,30579395 | 4,807692308 |
| 0,21 | 0,733112633 | 0,266149117 | 4,761904762 |
| 0,215 | 0,78476975 | 0,215027133 | 4,651162791 |
| 0,22 | 0,816802533 | 0,183115008 | 4,545454545 |
| 0,23 | 0,862494508 | 0,13799945 | 4,347826087 |
| 0,25 | 0,9086616 | 0,090969631 | 4 |
| 0,3 | 0,962367375 | 0,038422723 | 3,333333333 |
| 0,4 | 0,99058115 | 0,009319213 | 2,5 |

Таблиця 3.
Вакансійний механізм за алгоритмом Метрополіса.

| E_{mix}/kT | C_{alfa} | C_{beta} | kT/E_{mix} |
|--------------|-------------|-------------|--------------|
| 0,208 | 0,705218325 | 0,290373825 | 4,807692308 |
| 0,21 | 0,734239592 | 0,260308467 | 4,761904762 |
| 0,215 | 0,787069317 | 0,213377967 | 4,651162791 |
| 0,22 | 0,819631683 | 0,1804902 | 4,545454545 |
| 0,23 | 0,859286925 | 0,139530517 | 4,347826087 |
| 0,25 | 0,908969442 | 0,089775928 | 4 |
| 0,3 | 0,961201325 | 0,038469373 | 3,333333333 |
| 0,4 | 0,990719267 | 0,009467731 | 2,5 |

Таблиця 4.
Вакансійний механізм за алгоритмом Глаубера.

| E_{mix}/kT | C_{alfa} | C_{beta} | kT/E_{mix} |
|--------------|-------------|-------------|--------------|
| 0,208 | 0,7124315 | 0,291251442 | 4,807692308 |
| 0,21 | 0,73837975 | 0,269286875 | 4,761904762 |
| 0,215 | 0,789483042 | 0,215157067 | 4,651162791 |
| 0,22 | 0,822855575 | 0,180125467 | 4,545454545 |
| 0,23 | 0,862682967 | 0,1372936 | 4,347826087 |
| 0,25 | 0,910053883 | 0,090623065 | 4 |

Продовження таблиці 4.

| E_{mix}/kT | C_{alfa} | C_{beta} | kT/E_{mix} |
|--------------|-------------|-------------|--------------|
| 0,3 | 0,961617242 | 0,038483348 | 3,333333333 |
| 0,4 | 0,990861425 | 0,009564916 | 2,5 |

Таблиця 5.

Вакансійний механізм за Residence Time Algorithm.

| E_{mix}/kT | C_{alfa} | C_{beta} | kT/E_{mix} |
|--------------|-------------|-------------|--------------|
| 0,208 | 0,73012425 | 0,285057008 | 4,807692308 |
| 0,21 | 0,736232558 | 0,260327467 | 4,761904762 |
| 0,215 | 0,780804608 | 0,210252767 | 4,651162791 |
| 0,22 | 0,813826942 | 0,1812084 | 4,545454545 |
| 0,23 | 0,861944 | 0,138785517 | 4,347826087 |
| 0,25 | 0,909113417 | 0,091611846 | 4 |
| 0,3 | 0,961750533 | 0,037998778 | 3,333333333 |
| 0,4 | 0,990674092 | 0,009225173 | 2,5 |

Для аналізу, результати зручно представити у вигляді діаграми стану модельної системи. На рис. 4 побудована фазова діаграма стану модельного бінарного ГЦК сплаву з обмеженою розчинністю компонентів. Неперервно кривою представлено лінію фазової рівноваги отриману на основі теоретичної моделі регулярного твердого розчину [34]. Пунктирними кривими та маркерами представлено результати комп'ютерного моделювання решітковими методами Монте-Карло, за даними представленими у таблицях 1-5.

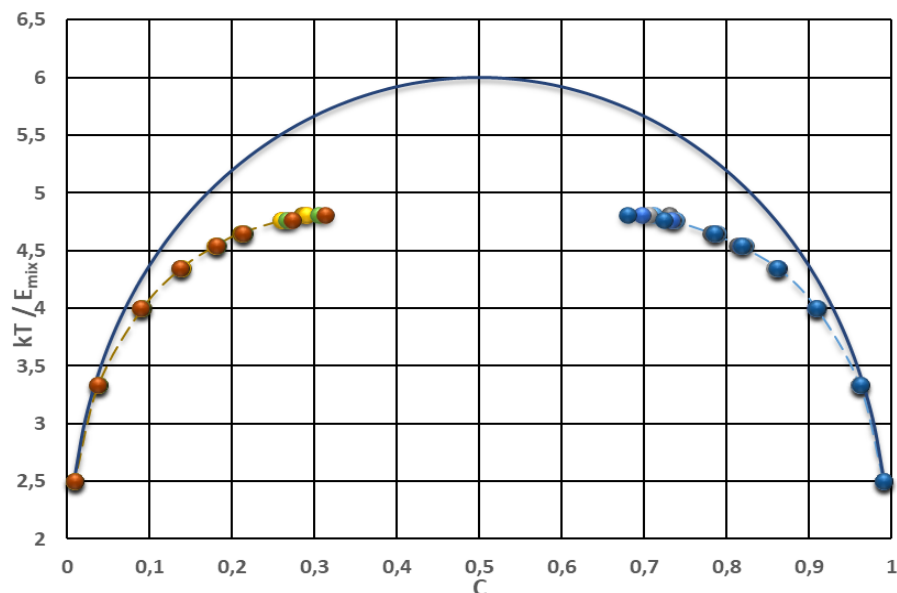


Рис. 4. Фазова діаграма стану бінарного ГЦК сплаву з обмеженою розчинністю компонентів. Неперервно кривою представлено лінію фазової рівноваги отриману на основі теоретичного методу регулярного твердого розчину. Пунктирною кривою та маркерами представлено результати комп'ютерного моделювання решітковими методами Монте-Карло за даними представленими у таблицях 1-5.

Можна бачити, що значення отримані за різними дифузійними механізмами та ймовірнісними алгоритмами відповідають певній єдиній кривій фазової рівноваги

модельної бінарної системи. Відсутність даних в центральній області концентрацій викликана складністю визначення рівноважних концентрацій методом дифузійної пари при відповідних параметрах системи в області близькій до однофазного рівноважного стану системи. Типовою є значна різниця між кривими фазової рівноваги бінарної системи отриманих на основі решіткових Монте-Карло і моделі регулярного твердого розчину.

На Рис. 5 представлено залежності приведеної різниці температур кривих фазової рівноваги для моделі регулярного твердого розчину і решіткових Монте-Карло методів від складу бінарного сплаву. Залежності є симетричними відносно концентрації 1/2. Крім того, вони є прямолінійними. Цей результат відкриває можливість, після подальших досліджень, встановити аналітичний вираз для кривої фазової рівноваги модельної системи для решіткових методів Монте-Карло шляхом удосконалення відповідних виразів для моделі регулярного твердого розчину.

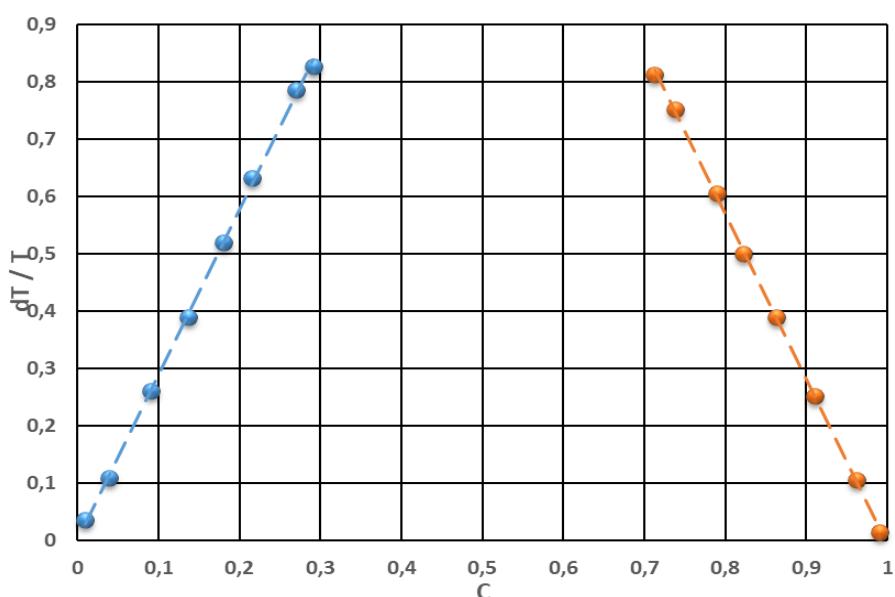


Рис. 5. Залежність приведеної різниці температур кривих фазової рівноваги для моделі регулярного твердого розчину і решіткових Монте-Карло моделей від складу.

Висновки

У роботі досліджено криві фазової рівноваги бінарних ГЦК-сплавів з обмеженою розчинністю компонентів на основі комп'ютерного моделювання решітковими методами Монте-Карло з використанням методу дифузійної пари. Для узагальнення результатів використано ймовірнісні алгоритми Глаубера та Метрополіса на основі обмінного та вакансійного дифузійних механізмів, а також Residence Time Algorithm для вакансійного механізму.

За результатами серії комп'ютерних експериментів побудовано фазову діаграму модельної бінарної системи з ГЦК ґраткою що базується на використанні решіткових Монте-Карло алгоритмів для моделювання кінетики дифузійних процесів на атомістичному рівні.

Підтверджено існування єдиної кривої фазової рівноваги модельної бінарної системи для решіткових методів Монте-Карло, що не залежить від конкретного дифузійного механізму та ймовірнісного алгоритму.

Виявлено лінійні залежності різниці приведених температур кривих фазової рівноваги від концентрації для моделі регулярного твердого розчину та модельної системи на основі решіткових методів Монте-Карло.

Подяки

Статтю написано згідно з держбюджетними темами «Сингулярні розв'язки рівнянь математичної фізики в анізотропних і неоднорідних середовищах, моделювання процесів дифузії та абсорбції» (№ державної реєстрації 0119U100421) і «Мультимасштабне моделювання конкурентної нуклеації, росту і коалесценції фаз в ізотермічних та СВС-реакціях» (№ державної реєстрації 0118U003861). Автор висловлює подяку Каленіченку Віталію Анатолійовичу за створення програмного забезпечення і проведення розрахунків.

Список використаної літератури:

1. Thijssen, J. M. Computational Physics / J. M. Thijssen. – Cambridge: Cambridge University Press, 1999. – 560 p. – Режим доступу: <http://www.cambridge.org/9781107677135>.
2. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике / Х. Гулд, Я. Тобочник. – Москва: Мир, 1990. – 752 с.
3. Хеерман, Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д. В. Хеерман. – Москва: Наука, 1990. – 176 с.
4. Поттер, Д. Вычислительные методы в физике / Д. Поттер. – Москва: Мир, 1975. – 392 с.
5. Гусак, А. М. Статистична фізика – основні положення та моделі / А. М. Гусак, В. Г. Гриценко, Т. В. Запорожець. – Черкаси: ЧДУ, 1998. – 288 с.
6. Bortz, A. V. Time evolution of a quenched binary alloy: Computer simulation of a two-dimensional model system / A. V. Bortz, M. H. Kalos, J. L. Lebowitz, M. A. Zendejas // Physical Review B. – 1974. – Vol. 10. – P. 535-541. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.10.535>.
7. Marro, J. Time evolution of a quenched binary alloy. II. Computer simulation of a three-dimensional model system / J. Marro, A. V. Bortz, M. H. Kalos, J. R. Lebowitz // Physical Review B. – 1975. – Vol. 12. – P. 2000-2011. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.4328>.
8. Flinn, P. A. Monte Carlo calculation of the order-disorder transformation in the body-centered cubic lattice / P. A. Flinn, G. M. McManus // Physical Review. – 1961. – Vol. 124. – Issue 1. – P. 54-59. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.54>.
9. Beller, J. R. Order-Disorder Events Produced by Single Vacancy Migration / J. R. Beller, J. A. Delaney // Physical Review. – 1963. – Vol. 130. – P. 962-971. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.130.962>.
10. Beller, J. R. Order-Disorder Events Produced by Single-Vacancy Migration. II / J. R. Beller // Physical Review. – 1965. – Vol. 138. – P. A1259-A1270. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A1259>.
11. Metropolis, N. Equation of state calculations by fast computing machines / N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller // Journal of Chemical Physics. – 1953. – Vol. 21. – P. 1087-1092. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.
12. Liu, Z.-J. Effects of amorphous matrix on the grain growth kinetics in two-phase nanostructured films: a Monte Carlo study / Z.-J. Liu, Y. G. Shen // Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52. – P. 729-736. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.10.010>.
13. Glauber, R. J. Time-dependent statistics of the Ising model / R. J. Glauber // Journal of Mathematical Physics. – 1963. – Vol. 4. – P. 294-307. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1703954>.
14. Oramus, P. Monte Carlo computer simulation of order-order kinetics in the L12-ordered Ni3Al binary system / P. Oramus, R. Kozubski // Physical Review B. – 2001. – Vol. 63. – P. 174109. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.174109>.
15. Oramus, P. Computer simulation of long-range order relaxation in homogeneous systems / P. Oramus, R. Kozubski, V. Perron-Bohnes, M. C. Cadeville, C. Massobrio, W. Pfeiler // Materials Science and Engineering A. – 2002. – Vol. 324. – P. 11-15. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(01\)01275-8](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01275-8).
16. Young, W. M. Monte Carlo studies of vacancy migration in binary ordered alloys / W. M. Young, E. Elcoc // Proceedings of the Physical Society. – 1966. – Vol. 89. – P. 735-746. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1088/0370-1328/89/3/329>.
17. Bortz, A. V. A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems / A. V. Bortz, M. H. Kalos, J. L. Lebowitz // Journal of Computational Physics. – 1975. – Vol. 17. – P. 10-18. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(75\)90060-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(75)90060-1).
18. Athenes, M. A Monte-Carlo study of B2 ordering and precipitation via vacancy mechanism in b.c.c. lattices / M. Athenes, P. Bellon, G. Martin, F. Haider // Acta Materialia. – 1996. – Vol. 44. – P. 4739-4748. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(96\)00135-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(96)00135-8).

19. Athenes, M. Identification of novel diffusion cycles in B2 ordered phases by Monte Carlo simulation / M. Athenes, P. Bellon, G. Martin // *Philosophical Magazine A*. – 1997. – Vol. 76. – P. 565-585. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/01418619708214023>.
20. Haider, F. Monte-Carlo study of the phase stability of ordered fcc phases under irradiation / F. Haider // *Ordering and Disordering in Alloys*; Edited by A. R. Yavari. – London: Elsevier Applied Science, 1992. – P. 215-222. – Режим доступу: https://doi.org/10.1007/978-94-011-2886-5_23.
21. De Fontane D. Cluster approach to order-disorder transformations in alloys / D. de Fontane // *Solid State Physics*. – 1994. – Vol. 47. – P. 33-176. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60639-6](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60639-6).
22. Wolverton, C. Short-range-order types in binary alloys: a reflection of coherent phase stability / C. Wolverton, V. Ozolinis, A. Zunger // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2000. – Vol. 12. – P. 2749-2768. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/12/314>.
23. Staunton, J. B. Compositional short-range ordering in metallic alloys: band-filling, charge-transfer, and size effects from a first-principles all-electron Landau-type theory. / J. B. Staunton, D. D. Johnson, F. J. Pinski // *Physical Review B*. – 1994. – Vol. 50. – P. 1450-1472. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.1450>.
24. Zaporozhets, T. V. 3D-Simulation of Void Formation, Growth and Migration under Electromigration / T. V. Zaporozhets, I. V. Sobchenko, A. M. Gusak // *Defect and Diffusion Forum*. – 2005. – Vol. 237. – P. 1306-1311. – Режим доступу: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.1306>.
25. Tu, K. N. Linear rate of grain growth in thin films during deposition / K. N. Tu, A. M. Gusak, I. Sobchenko // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67. – P. 245408. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.245408>.
26. Sobchenko, I. V. 3D Monte-Carlo model of deposition and grain growth in thin films / I. V. Sobchenko, A. M. Gusak, K. N. Tu // *Defect and Diffusion Forum*. – 2005. – Vol. 237. – P. 1281-1286. – Режим доступу: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.1281>.
27. Hin, C. Atomistic Monte Carlo simulations of homogeneous and heterogeneous precipitation on grain boundaries of NbC in steels / C. Hin, F. Soisson, Ph. Maugis // *Defect and Diffusion Forum*. – 2005. – Vol. 237. – P. 721-726. – Режим доступу: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.721>.
28. Rubio, J. E. Atomistic Monte Carlo simulations of three-dimensional polycrystalline thin films / J. E. Rubio, M. Jaraiz, I. Martin-Bragado, J. M. Hernandez-Mangas, J. Barbolla // *Journal of Applied Physics*. – 2003. – Vol. 94. – P. 163-168. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1063/1.1577814>.
29. Gusak, A. Initial Stage of Reactive Diffusion: Nucleation and Avrami Kinetics / A. Gusak, A. O. Bogatyrev, A. O. Kovalchuk // *Defect and Diffusion Forum*. – 2001. – Vol. 194. – P. 1625-1630. – Режим доступу: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.194-199.1625>.
30. Gusak, A. M. Oscillatory regime of ordering during interdiffusion / A. M. Gusak, A. O. Kovalchuk // *Physical Review B*. – 1998. – Vol. 58. – P. 2551-2555. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.2551>.
31. Гусак, А. М. Модели твердофазных реакций / А. М. Гусак, А. О. Богатырев, Т. В. Запорожец, А. А. Ковальчук, С. В. Корниенко, Г. В. Луценко, Ю. А. Ляшенко, А. С. Ширинян. – Черкассы: ЧНУ, 2004. – 314 с.
32. Pasichnyy, M. O. Modeling of Phase Competition and Diffusion Zone Morphology Evolution at Initial Stages of Reaction Diffusion / M. O. Pasichnyy, A. M. Gusak // *Defect and Diffusion Forum*. – 2005. – Vol. 237. – P. 1193-1198. – Режим доступу: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.1193>.
33. Пасічний, М. О. Монте-Карло дослідження початкових етапів реакційної дифузії у мультишарах / М. О. Пасічний // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2007. – Вип. 114. – С. 65-72.
34. Gusak, A. M. Modeling of Concentration and Temperature Dependencies of Incubation Time at Decomposition of Solid Solution by Monte Carlo Method / A. M. Gusak, V. M. Pasichna // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2018. – Вип. 1. – С. 3-11. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2018-1-3-11>.

Bibliography:

1. Thijssen, J. M. (1999). *Computational Physics*. Cambridge: Cambridge University Press. Retrieved from <http://www.cambridge.org/9781107677135>.
2. Guld, Kh., Tobochnik, Ya. (1990). *Kompiuternoe modelirovanie v fizike [Computer modeling in physics]*. Moskva: Mir [in Russian].
3. Kheerman, D. V. (1990). *Metody kompiuternogo eksperimenta v teoreticheskoi fizike [Methods of computer experiment in theoretical physics]*. Moskva: Nauka [in Russian].
4. Potter, D. (1975). *Vychislitelnye metody v fizike [Computational methods in physics]*. Moskva: Mir [in Russian].

5. Gusak, A. M., Grytsenko, V. G., Zaporozhets, T. V. (1998). *Statystychna fizyka – osnovni polozhennia ta modeli* [Statistical physics – basic principles and models]. Cherkasy: ChDU [in Ukrainian].
6. Bortz, A. B., Kalos, M. H., Lebowitz, J. L., Zendejas, M. A. (1974). Time evolution of a quenched binary alloy: Computer simulation of a two-dimensional model system. *Physical Review B*, 10, 535-541. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.10.535>
7. Marro, J., Bortz, A. B., Kalos, M. H., Lebowitz, J. R. (1975). Time evolution of a quenched binary alloy. II. Computer simulation of a three-dimensional model system. *Physical Review B*, 12, 2000-2011. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.4328>.
8. Flinn, P. A., McManus, G. M. (1961). Monte Carlo calculation of the order-disorder transformation in the body-centered cubic lattice. *Physical Review*, 124(1), 54-59. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.54>.
9. Beller, J. R., Delaney, J. A. (1963). Order-Disorder Events Produced by Single Vacancy Migration. *Physical Review*, 130, 962-971. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRev.130.962>.
10. Beller, J. R. (1965). Order-Disorder Events Produced by Single-Vacancy Migration. II. *Physical Review*, 138, A1259-A1270. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A1259>.
11. Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, 21, 1087-1092. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.
12. Liu, Z.-J., Shen, Y. G. (2004). Effects of amorphous matrix on the grain growth kinetics in two-phase nanostructured films: a Monte Carlo study. *Acta Materialia*, 52, 729-736. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.10.010>.
13. Glauber, R. J. (1963). Time-dependent statistics of the Ising model. *Journal of Mathematical Physics*, 4, 294-307. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1703954>.
14. Oramus, P., Kozubski, R. (2001). Monte Carlo computer simulation of order-order kinetics in the L12-ordered Ni₃Al binary system. *Physical Review B*, 63, 174109. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.174109>.
15. Oramus, P., Kozubski, R., Perron-Bohnes, V., Cadeville, M. C., Massobrio, C., Pfeiler, W. (2002). Computer simulation of long-range order relaxation in homogeneous systems. *Materials Science and Engineering A*, 324, 11-15. Retrieved from [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(01\)01275-8](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01275-8).
16. Young, W. M., Elcoc, E. (1966). Monte Carlo studies of vacancy migration in binary ordered alloys. *Proceedings of the Physical Society*, 89, 735-746. Retrieved from <https://doi.org/10.1088/0370-1328/89/3/329>.
17. Bortz, A. B., Kalos, M. H., Lebowitz, J. L. (1975). A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems. *Journal of Computational Physics*, 17, 10-18. Retrieved from [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(75\)90060-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(75)90060-1).
18. Athenes, M., Bellon, P., Martin, G., Haider, F. (1996). A Monte-Carlo study of B2 ordering and precipitation via vacancy mechanism in b.c.c. lattices. *Acta Materialia*, 44, 4739-4748. Retrieved from [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(96\)00135-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(96)00135-8).
19. Athenes, M., Bellon, P., Martin, G. (1997). Identification of novel diffusion cycles in B2 ordered phases by Monte Carlo simulation. *Philosophical Magazine A*, 76, 565-585. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/01418619708214023>.
20. Haider, F. (1992). Monte-Carlo study of the phase stability of ordered fcc phases under irradiation. *Ordering and Disorder in Alloys*; Edited by A. R. Yavari. London: Elsevier Applied Science, 215-222. Retrieved from https://doi.org/10.1007/978-94-011-2886-5_23.
21. De Fontane, D. (1994). Cluster approach to order-disorder transformations in alloys. *Solid State Physics*, 47, 33-176. Retrieved from [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60639-6](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60639-6).
22. Wolverson, C., Ozolinis, V., Zunger, A. (2000). Short-range-order types in binary alloys: a reflection of coherent phase stability. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 12, 2749-2768. Retrieved from <https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/12/314>.
23. Staunton, J. B., Johnson, D. D., Pinski, F. J. (1994). Compositional short-range ordering in metallic alloys: band-filling, charge-transfer, and size effects from a first-principles all-electron Landau-type theory. *Physical Review B*, 50, 1450-1472. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.1450>.
24. Zaporozhets, T. V., Sobchenko, I. V., Gusak A. M. (2005). 3D-Simulation of Void Formation, Growth and Migration under Electromigration. *Defect and Diffusion Forum*, 237, 1306-1311. Retrieved from <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.1306>.
25. Tu, K. N., Gusak, A. M., Sobchenko, I. (2003). Linear rate of grain growth in thin films during deposition. *Physical Review B*, 67, 245408. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.245408>.
26. Sobchenko, I. V., Gusak, A. M., Tu, K. N. (2005). 3D Monte-Carlo model of deposition and grain growth in thin films. *Defect and Diffusion Forum*, 237, 1281-1286. Retrieved from <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.1281>.

27. Hin, C., Soisson, F., Maugis, Ph. (2005). Atomistic Monte Carlo simulations of homogeneous and heterogeneous precipitation on grain boundaries of NbC in steels. *Defect and Diffusion Forum*, 237, 721-726. Retrieved from <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.721>.
28. Rubio, J. E., Jaraiz, M., Martin-Bragado, I., Hernandez-Mangas, J. M., Barbolla, J. (2003). Atomistic Monte Carlo simulations of three-dimensional polycrystalline thin films. *Journal of Applied Physics*, 94, 163-168. Retrieved from <https://doi.org/10.1063/1.1577814>.
29. Gusak, A., Bogatyrev, A. O., Kovalchuk, A. O. (2001). Initial Stage of Reactive Diffusion: Nucleation and Avrami Kinetics. *Defect and Diffusion Forum*, 194, 1625-1630. Retrieved from <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.194-199.1625>.
30. Gusak, A. M., Kovalchuk, A. O. (1998). Oscillatory regime of ordering during interdiffusion. *Physical Review B*, 58, 2551-2555. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.2551>.
31. Gusak, A. M., Bogatyrev, A. O., Zaporozhets, T. V., Kovalchuk, A. A., Kornienko, S. V., Lutsenko, G. V., Liashenko, Yu. A., Shirinian, A. S. (2004). *Modeli tverdogfaznykh reaktsii [Models of solid-phase reactions]*. Cherkassy: ChNU [in Russian].
32. Pasichnyy, M. O., Gusak, A. M. (2005). Modeling of Phase Competition and Diffusion Zone Morphology Evolution at Initial Stages of Reaction Diffusion. *Defect and Diffusion Forum*, 237, 1193-1198. Retrieved from <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.1193>.
33. Pasichnyy, M. O. (2007). Monte-Karlo doslidzhennia pochatkovykh etapiv reaktsiinoi dyfuzii u multysharakh [Monte Carlo study of initial stages of reaction diffusion in multilayers]. *Visnyk Cherkaskoho universytetu. Seriya "Fyzyko-matematychni nauky"* – Bulletin of Cherkasy University. Series of Physical and Mathematical Sciences, 114, 65-72 [in Ukrainian].
34. Gusak, A. M., Pasichna, V. M. (2018) Modeling of Concentration and Temperature Dependencies of Incubation Time at Decomposition of Solid Solution by Monte Carlo Method. *Visnyk Cherkaskoho universytetu. Seriya "Fyzyko-matematychni nauky"* – Bulletin of Cherkasy University. Series of Physical and Mathematical Sciences, 1, 3-11. Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2018-1-3-11>.

PASICHNYY Mykola,

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Chair of Physics, The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,

MONTE-CARLO INVESTIGATION OF PHASE EQUILIBRIUM CURVES OF BINARY FCC ALLOYS WITH LIMITED SOLUBILITY

Summary. Introduction. *The phase equilibrium curves of binary FCC alloys with limited solubility of components were investigated by Monte Carlo lattice methods. The existence of a single phase diagram of the modeled system is confirmed. It does not depend on the diffusion mechanism and probability algorithm of Monte-Carlo methods. The linear dependences of the difference of the reduced temperatures of the phase equilibrium curves for the regular solid solution model and the modeled system based on the lattice Monte Carlo methods are approved.*

Purpose. *The purpose of the work is investigation of the phase equilibrium curves of binary FCC alloy with limited solubility of components by lattice Monte Carlo methods and analysis the results for different diffusion mechanisms and probability algorithms: the exchange and vacancy mechanisms for the Metropolis and Glauber algorithms and the vacancy mechanism for the Residence Time algorithm.*

Results. *Three-dimensional face-centered cubic lattice with 50x20x20 sites occupied by atoms of two species was used as a model system. The approximation of the first coordination shell was used for the simulation. Born-Karman periodic boundary conditions were used as boundary conditions. The diffusion couple method was used for calculation of equilibrium concentrations of the binary system with limited solubility of the components. The main thermodynamic parameter of the modeled system is the energy of mixing of binary solid solution. The series of computer simulations were performed using: Metropolis algorithm with exchange mechanism; Glauber algorithm with exchange mechanism; Metropolis algorithm with vacancy mechanism; Glauber algorithm with vacancy mechanism; Residence Time Algorithm with vacancy mechanism. As a result of modeling the kinetics of diffusion processes, the system is relaxed to equilibrium corresponding to the contact of two binary solid solutions. Significant difference of equilibrium concentrations at phase diagram curves was obtained between values modeled by lattice Monte-Carlo and a regular solid solution model. The values obtained by all considered Monte Carlo algorithms correspond to a single curve of phase equilibrium of the modeled binary system.*

Conclusion. In the paper, the phase equilibrium curves of binary FCC alloys with limited solubility of components were investigated by computer simulations by lattice Monte Carlo methods using the diffusion couple method. The Glauber and Metropolis algorithms based on exchange and vacancy diffusion mechanisms, as well as Residence Time Algorithm for the vacancy mechanism were used for the numerical simulation. The phase diagram of FCC binary system with limited solubility of components was constructed by lattice Monte Carlo algorithms based on the simulation of kinetics of diffusion processes at an atomic level. The existence of a single curve of phase equilibrium of the modeled binary system is confirmed for different lattice Monte Carlo methods. The linear dependences of the difference of the reduced temperatures of the phase equilibrium curves on the concentration for a model of a regular solid solution and a model binary system based on the lattice Monte Carlo method were obtained.

Keywords: Monte Carlo, binary alloy, regular solid solution, diffusion couple method.

Одержано редакцією 08.08.2019 р.
Прийнято до публікації 09.10.2019 р.

УДК 004.85:519.6

DOI 10.31651/2076-5886-2019-2-86-95

PACS 02.70.Wz, 07.05.Kf, 07.05.Mh,
07.05.Tr

ПІСКУН Олександр Варфоломійович

кандидат технічних наук, доцент,
завідувач кафедри прикладної математики
та інформатики, Черкаський національний
університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: piskun@ukr.net
ORCID 0000-0001-5334-6337

АНАЛІЗ АЛГОРИТМІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ ЗАДАЧІ БІНАРНОЇ КЛАСИФІКАЦІЇ

У роботі був проведений аналіз існуючих найбільш поширених методів класифікації на предмет їх використання в задачі діагностики серцевих захворювань. Розглянуто основні метрики якості моделей бінарної класифікації, які можуть бути використані при ухваленні рішення про оптимальність розробленої моделі. Дослідження моделей проводились без і з оптимізацією параметрів. Оптимізація параметрів моделей проведена, використовуючи криві валідації з подальшим пошуком по сітці з крос-валідацією кожної комбінації параметрів. Найкращі результати показали методи *DecisionTreeClassifier*, *GradientBoostingClassifier* та *GaussianNB*.

Ключові слова: машинне навчання, метрики якості, бінарна класифікація, алгоритми класифікації

Вступ

Бінарна класифікація - одна з найбільш поширених проблем прикладної статистики та машинного навчання, яка вирішується в багатьох прикладних областях - в медицині, біології, метеорології, аналізі поштових повідомлень, класифікації текстів, зображень і т.д.

Розглянемо задачу бінарної класифікації об'єктів, в якій кожен об'єкт K_i ($i = 1, \dots, N$) характеризується m -мірним вектором ознак $(X_1 \dots X_m)$. Ці характеристики (або ознаки) можуть приймати як числові, так і нечислові значення та утворюють вибірку для подальших досліджень. Потрібно на підставі значень ознак передбачити вихідну характеристику об'єктів u , яка може приймати одне з двох значень (0 або 1).

Існує багато методів класифікації, такі як дерева рішень, нейронні мережі, байесовський класифікатор, метод опорних векторів, логістична регресія і ін., які використовують різний математичний апарат і різні підходи при реалізації [1]. Однак, їх ефективність залежить від конкретної задачі і на сьогоднішній день не існує методів,