Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0222U003257

Державний реєстраційний номер: 0121U108687

Відкрита

Дата реєстрації: 22-02-2022

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання дифузійних процесів у багатошарових покриттях. Термодинаміка і кінетика нуклеації в бінарних розчинах. Розв'язання оберненої задачі статистичного моделювання складних систем методом Монте-Карло.

Початок етапу: 01-2021

Закінчення етапу: 12-2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 14312223

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Академічна, буд. 1, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61108, Україна

Телефон: 380573353530

Телефон: 380573351688

Телефон: 380573356425

E-mail: nsc@kipt.kharkov.ua

WWW: https://www.kipt.kharkov.ua/

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Підпорядкованість:

Телефон: 380442343243

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://nas.gov.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 5240.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Теорія фазових перетворень, кінетичних і дифузійних явищ в конденсованих середовищах

Назва роботи (англ)

A theory of phase transformations, kinetic and diffusion phenomena in condensed media

Реферат (укр)

1. Моделюється поведінка двошарових захисних покриттів Zn-Mg під час відпалу. Відпал сприяє утворенню MgZn2 на верхній поверхні покриття і Mg2Zn11 на межі розділу між шаром Zn і верхнім шаром ZnMg, що призводить до поліпшення корозійної стійкості та механічних характеристик. Сформульовано дифузійну модель фазового перетворення. Основні рівняння дифузії з рухомими межами розділу розв'язуються числовим методом з використанням перетворення просторової змінної, що зводить дифузійну задачу до еквівалентної задачі дифузії з фіксованими межами розділу. Передбачення моделі добре узгоджуються з експериментальними результатами. 2. Для дослідження кінетики нуклеації в конденсованих бінарних розчинах запропоновано новий підхід, що є комбінацією класичної термодинаміки і макроскопічної кінетики. Теорія охоплює розпад рідких і твердих розчинів, що відбувається шляхом нуклеації, а також перетворення рідина-тверде тіло. Розглянуто випадки зародження двокомпонентних виділень як фіксованого, так і змінного складу. Одержано рівняння рівноваги критичного зародка і визначено його параметри, а саме критичний радіус, склад. Рівняння рівноваги зародка потім використовуються в макроскопічних дифузійних рівняннях його зростання. Цей підхід може бути використано в загальному випадку неідеального розчину. 3. Розглянуто проблему неопуклої стохастичної оптимізації, з якою зазвичай стикаються під час навчання глибоких нейронних мереж. У фізичному моделюванні подібну задачу можна вирішити за допомогою усталеного методу динаміки Ланжевена в поєднанні з імітованим відпалом. На основі рішення дискретного рівняння Ланжевена з повільно зростаючим коефіцієнтом в'язкості, запропоновано новий метод стохастичної оптимізації – CoolMomentum. Показано, що він здатний досягти високої точності з нейромережею Resnet-20 на наборі даних Cifar-10 та нейромережею Efficientnet-B0 на наборі даних Imagenet.

Реферат (англ)

1. The behavior of two-layer protective coatings Zn-Mg during annealing is modeled. Annealing promotes the formation of MgZn2 on the upper surface of the coating and Mg2Zn11 on the interface between the Zn layer and the upper layer of ZnMg, which leads to improved corrosion resistance and mechanical characteristics. A diffusion model of this phase transformation is formulated. The basic diffusion equations with moving boundaries are solved numerically applying the transformation of the spatial variable that reduces the diffusion problem to the equivalent diffusion problem with fixed boundaries. The model predictions agree well with experimental results. 2. To study the kinetics of nucleation in condensed binary solutions, a new approach is proposed, which is a combination of classical thermodynamics and macroscopic kinetics. The theory covers the decomposition of liquid and solid solutions proceeding via the nucleation pathway as well as liquid-solid transformation. The cases of nucleation of two-component precipitates of both fixed and variable composition are considered. The equation of equilibrium of the critical nucleus is obtained and its parameters are determined, namely the critical radius and composition. The nucleus equilibrium equations are then used in macroscopic diffusion equations of its growth. This approach can be used in the general case of an non-ideal solution. 3. The problem of non-convex stochastic optimization, usually faced while training deep neural networks, is considered. In physical modeling a similar problem can be solved using the established method of Langevin dynamics in combination with simulated annealing. Based on the solution of the discrete Langevin equation with a slowly increasing viscosity coefficient, a new method of stochastic optimization - CoolMomentum, is proposed. It is shown to achieve high accuracies with the Resnet-20 neural network on the Cifar-10 dataset and the Efficientnet-B0 neural network on

the Imagenet dataset.

Індекс УДК: 531.4, 531.4, [536.425+538.93+537.874]:538.911

Коди тематичних рубрик НТІ: 30.15.41

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Coolmomentum: алгоритм стохастичної оптимізації штучних нейронних мереж

Назва продукції (англ): Coolmomentum: an algorithm for stochastic optimization of artificial neural networks

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: К 73.10.0 Дослідження та розробки в галузі природничих та технічних наук

Опис продукції (укр): Стохастична оптимізація неопуклої цільової функції параметрів штучної нейромережі проводиться методом ітерацій на основі рішення дискретного рівняння Ланжевена. Для застосування імітованого відпалу, коефіцієнт інерції повільно зменшується за певним графіком від початкового значення, близького до одиниці, до нуля.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" НАН України (ННЦ "ХФТІ")

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. В.Е.Кутний, А.В.Рыбка, Л.Н.Давыдов, А.А.Захарченко, Д.В.Кутний, А.С.Абызов. Детекторы ионизирующих излучений на основе теллурида кадмия-цинка. Харьков: Типография Мадрид, 2021, 352 с. ISBN 978-617-7988-21-1.

2. Котляр В.В. Електромагнітні процеси за участю тричастинкових систем. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико–математичних наук. Харків, 2021. 192 С. https://kipt.kharkov.ua/councils/2021/Kotliar/DisKotliar.html

3. Лаврова Г. М. Кінетика фазонних дефектів та радіаційних пошкоджень в квазікристалах. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико–математичних наук. Харків, 2021. 139 С. https://kipt.kharkov.ua/councils/2021/Lavrova/DisLavrova.html

4. Абизов О. С. Узагальнений підхід Гіббса у теорії нуклеації. Дисертації на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук. Харків, 2021. 363 С. https://kipt.kharkov.ua/councils/2021/Abyzov/DisAbyzov.html

5. Котляр В.В. Електромагнітні процеси за участю тричастинкових систем. Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико–математичних наук. Харків, 2021, 23 С. https://kipt.kharkov.ua/councils/2021/Kotliar/ArefKotliar.html

6. Лаврова Г. М. Кінетика фазонних дефектів та радіаційних пошкоджень в квазікристалах. Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико–математичних наук. Харків, 2021. 20 С. https://kipt.kharkov.ua/councils/2021/Lavrova/ArefLavrova.html

7. Абизов О. С. Узагальнений підхід Гіббса у теорії нуклеації. Автореферат дисертаціїна здобуття наукового ступеня

доктора фізико-математичних наук. Харків, 2021. 40 С. https://kipt.kharkov.ua/councils/2021/Abyzov/ArefAbyzov.html

8. Borysenko O., Byshkin M. CoolMomentum: A Method for Stochastic Optimization by Langevin Dynamics with Simulated Annealing. Scientific Reports, 11 (2021) 10705(1-8). https://doi.org/10.1038/s41598-021-90144-3

9. Alekseechkin N. V. Kinetics of grain-boundary nucleated transformations in rectangular geometries and one paradox relating to Cahn's model, Acta Mater. 221 (2021) 117350. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117350

10. Fokin V.M., Abyzov A.S., Yuritsyn N.S., Schmelzer J.W.P., and Zanotto E.D., Effect of structural relaxation on crystal nucleation in glasses. Acta Materialia 203 (2021) 116472, https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.11.014

12. Rodrigues L.R., Abyzov A.S., Fokin V.M., Zanotto E.D., Effect of structural relaxation on crystal nucleation in a soda-lime-silica glass. Journal of American Ceramic Society 104 (2021) 3212–3223. https://doi.org/10.1111/jace.17765

13. Rodrigues L.R., Abyzov A.S., Fokin V.M., Schmelzer J.W.P., Zanotto E.D., Relaxation effect on crystal nucleation in a glass unveiled by experimental, numerical, and analytical approaches. Acta Materialia 223 (2021) 117458. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117458

14. Burdeinyi D., Kutnii D., Levenets V., Turkin A., Marks N., Lindvall R., Treinen K. Application of HRGS for forensic characterization of uranium oxides, pure uranium metals and uranium alloys, Applied Radiation and Isotopes, Vol. 177 (2021) 109910. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2021.109910

15. Shklovskij V. A., Bezuglyj A. I., Mironenko I. V. Heat transport in insulator/ferromagnetic-insulator/insulator heterogeneous nanostructures at low temperatures, Phys. Rev. B 103, (2021) 024440. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.024440

16. Poluektov Y.M. Debye model for the surface phonons. Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur 47 (2021) 446–453. https://doi.org/10.1063/10.0004236 [arXiv:2102.04246]

17. Poluektov Y.M. Nuclear and electronic coherence in superfluid helium. Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur, 47 (2021) 693. https://doi.org/10.1063/10.0005558 [arXiv:2103.07874]

18. Полуэктов Ю.М. Зависимость скорости распространения равновесного излучения от температуры. Известия вузов. Физика. 10 (2021) 16–25.

19. Poluektov Y. M., Soroka A. A. Transition of a binary solution into an inhomogeneous phase. arXiv:2109.02404 [cond-mat.stat-mech]. Submitted on 6 Sep 2021.

20. Miotto J. M., Pigolotti S., Chechkin A. V., Roldán-Vargas S. Length Scales in Brownian yet Non-Gaussian Dynamics. Phys. Rev. X 11 (2021) 031002. https://doi.org/10.1103/PhysRevX.11.031002

21. Dahlenburg M., Chechkin A. V., Schumer R., Metzler R. Stochastic resetting by a random amplitude. Phys. Rev. E 103 (2021) 052123. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.052123

22. Kurilovich A. A., Mantsevich V. N., Stevenson K. J., Chechkin A. V., Palyulin V. V. Trapping-influenced photoluminescence intensity decay in semiconductor nanoplatelets. Journ. Physics: Conference Series 2015 (2021) 012103. https://doi.org/10.1088/1742-6596/2015/1/012103

23. Awad E., Sandev T., Metzler R., Chechkin A. Closed-form multi-dimensional solutions and asymptotic behaviors for subdiffusive processes with crossovers: I. Retarding case. Chaos, Solitons and Fractals 152 (2021) 111357. https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.111357

24. Pitera M., Chechkin A., Wyłomanska A. Goodness-of-fit test for a-stable distribution based on the quantile conditional variance statistics. Stat. Methods Appl. (2021), https://doi.org/10.1007/s10260-021-00571-9

25. Guggenberger T., Chechkin A., Metzler R. Fractional Brownian motion in superharmonic potentials and non-Boltzmann stationary distributions. J. Phys. A: Math. Theor. 54 (2021) 29LT01. http://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/ac019b

26. Awad E., Sandev T., Metzler R., Chechkin A. From continuous-time random walks to the fractional Jeffreys equation: Solution and properties. Int. J. Heat Mass Transfer 181 (2021) 121839. https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121839

27. Chechkin A., Sokolov I. M. Relation between generalized diffusion equations and subordination schemes. Phys. Rev. E 103

(2021) 032133. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.032133

28. Varghese A. J., Chechkin A., Metzler R., Sujith R. I. Capturing multifractality of pressure fluctuations in thermoacoustic systems using fractional-order derivatives. Chaos 31 (2021) 033108. https://doi.org/10.1063/5.0032585

29. Thapa S., Wyłomańska A., Sikora G., Wagner C. E., Krapf D., Kantz H., Chechkin A. V., Metzler R. Leveraging large-deviation statistics to decipher the stochastic properties of measured trajectories. New J. Phys. 23 (2021) 013008. https://doi.org/10.1088/1367-2630/abd50e

30. Lavrova G. N., Turkin A. A., Bakai A. S. Bias factor of dislocation loops in quasicrystalline materials, 2021. https://arxiv.org/abs/2109.04136v2

31. Schick C., Andrianov R.A., Androsch R., Zhang R., Mukhametzyanov T.A., Abyzov A.S., Schmelzer J.W.P. Growth and dissolution of crystal nuclei in PLLA, North American Thermal Analysis Society 47th Annual Conference, August 3-6, 2021.

32. Котляр В.В., Щусь А.Ф. Расчеты сечений рождения боттом кварков в электрон–позитронной аннигилции. XIX Конференція з фізики високих енергій і ядерної фізики:Тези доповідей (23-26 березня, 2021р, Харків). Харків, 2021. С. 21. https://www.kipt.kharkov.ua/conferences/ihepnp/2021/tezis.pdf

33. Котляр В.В., Щусь А.Ф. Рождение мезонов со скрытым очарованием из распадов b–адронов в e+ e− – столкновениях. XIX Конференція з фізики високих енергій і ядерної фізики:тези доповідей (23-26 березня, 2021р, Харків). Харків, 2021. С. 21-22. https://www.kipt.kharkov.ua/conferences/ihepnp/2021/tezis.pdf

34. Котляр В.В., Маслов Н.И. Однопетлевые КХД процессы в рождении b-кварков и образование чармониев в протон–протонном рассеянии на большом адронном коллайдере ЦЕРН. XIX Конференція з фізики високих енергій і ядерної фізики:тези доповідей (23-26 березня, 2021р, Харків). Харків, 2021. С. 22. https://www.kipt.kharkov.ua/conferences/ihepnp/2021/tezis.pdf

35. Chechkin A. Beyond Fractional Brownian Motion. Venice meeting on Fluctuations in small complex systems V: Istituto Veneto di Scienze, Lettere ed Arti, Palazzo Franchetti, Venezia, 3-7 October 2021 (invited speaker, on-site).

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 37

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Абизов Олександр Сергійович (д. ф.-м. н.)

Алєксєєчкин Микола Васильович (к. ф.-м. н.)

Безуглий Олексій Іванович (к. ф.-м. н.)

Борисенко Олександр Олексійович (к. ф.-м. н.)

Давидов Леонід Миколайович (к. ф.-м. н.)

Котляр Володимир Вікторович

Лаврова Галина Миколаївна (к. ф.-м. н.)

Лазарєв Микола Павлович (к. ф.-м. н., с.н.с.)

Мчедлов-Петросян Петро Отарович (к. ф.-м. н.)

Полуектов Юрій Матвійович (д.ф.-м.н., с.н.с.)

Сорока Олексій Олександрович (к. ф.-м. н.)

Степановський Юрій Петрович (к. ф.-м. н.)

Туркін Анатолій Аркадійович (д. ф.-м. н., пров.н.с.)

Чечкін Олексій Вікторович (д. ф.-м. н.)

Керівник організації:

Шульга Микола Федорович (д. ф.-м. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Бакай Олександр Спепанович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.