

**APPLICATION OF A GENETIC ALGORITHM FOR SELECTING THE ENERGIES  
OF PAIRED INTERATOMIC INTERACTIONS THAT PROVIDE  
THE MINIMUM ENERGY OF A GIVEN BINARY ORDERED ALLOY  
OF THE  $A_nB_m$  COMPOSITION**

*Albert Rashitovich Khalikov*<sup>1a</sup>, *Mikhail Dmitrievich Starostenkov*<sup>2</sup>,  
*Elena Aleksandrovna Korznikova*<sup>1</sup>, *Sergey Vladimirovich Dmitriev*<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Ufa University of Science and Technology, 32 Zaki Validi st., 450076, Ufa, Russia

<sup>2</sup> Altai State Technical University named after I.I. Polzunov, 46 Lenin pr., 656038, Barnaul, Russia

<sup>3</sup> Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of the Russian Academy of Sciences, 71 Oktyabrya pr., Russia, 450054, Ufa, Russia

<sup>a</sup> khalikov.albert.r@gmail.com

## ABSTRACT

In this work, we present a methodology for selecting pairwise interatomic potentials for binary metallic alloys  $A_nB_m$  with a face-centered cubic lattice that accounts for interactions up to the fifth coordination shell. Extending the interaction range is essential for accurately describing Friedel oscillations, which influence point-defect energies, the stability of ordered phases, the kinetics of plastic deformation, and dislocation mobility. A direct parameter sweep leads to a geometric growth in the number of independent variables and an exponential rise in computational cost (on the order of  $10^{45}$  variants at four-digit precision), rendering such an approach impractical. To achieve efficient optimization, we employed a genetic algorithm, which performs a global search in multidimensional space and reduces optimization time to seconds while preserving accuracy and reproducibility. The resulting potentials were validated by simulating vacancy diffusion via the Monte Carlo Metropolis algorithm on a two-dimensional  $15 \times 40$  lattice at  $100^\circ\text{C}$ , yielding eutectic, checkerboard, and striped ordering patterns. The combination of a physically grounded multichannel model with an evolutionary optimizer opens new opportunities for detailed large-scale studies of ordering mechanisms and phase dynamics in multicomponent systems. The findings demonstrate the high accuracy and adaptability of the developed approach.

## KEYWORDS

Monte Carlo method (Metropolis algorithm); genetic algorithm; interatomic potentials; face-centered cubic lattice; binary metallic alloys; vacancy diffusion.

**ПРИМЕНЕНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ ВЫБОРА ЭНЕРГИЙ  
ПАРНЫХ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ  
МИНИМУМ ЭНЕРГИИ ЗАДАННОГО БИНАРНОГО УПОРЯДОЧЕННОГО  
СПЛАВА СОСТАВА  $A_nB_m$**

*Альберт Рашитович Халиков*<sup>1a</sup>, *Михаил Дмитриевич Старостенков*<sup>2</sup>,  
*Елена Александровна Корзникова*<sup>1</sup>, *Сергей Владимирович Дмитриев*<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия

<sup>2</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

<sup>3</sup> Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, пр. Октября, 71, Россия, 450054, Уфа, Россия

<sup>a</sup> khalikov.albert.r@gmail.com

## АННОТАЦИЯ

В работе представлена методика подбора парных межатомных потенциалов для бинарных металлических сплавов  $A_nB_m$  с ГЦК-решеткой, учитывающая взаимодействия до пятой координационной сферы. Расширение радиуса взаимодействий необходимо для точного описания фриделевских осцилляций, влияющих на энергию точечных дефектов, устойчивость упорядоченных фаз, кинетику пластической деформации и подвижность дислокаций. Прямой метод перебора параметров приводит к геометрическому росту числа независимых величин и экспоненциальному увеличению вычислительных затрат ( $\approx 10^{45}$  вариантов при четырехзначной точности), что делает такой подход непрактичным. Для эффективной оптимизации применен генетический алгоритм, обеспечивающий глобальный поиск в многомерном пространстве и сокращающий время оптимизации до секунд при сохранении точности и воспроизводимости. Проверка потенциалов проведена через моделирование вакансионной диффузии методом Монте-Карло (алгоритм Метрополиса) на двумерной решетке  $15 \times 40$  при  $100^\circ\text{C}$ ; при этом были получены эвтектическая, шахматная и полосчатая структуры. Сочетание физически обоснованной многоканальной модели и эволюционного оптимизатора открывает новые возможности детального широкомасштабного исследования механизмов упорядочения и фазовой динамики многокомпонентных систем. Полученные результаты свидетельствуют о высокой точности и адаптивности разработанного подхода.

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Метод Монте-Карло (алгоритм Метрополиса); генетический алгоритм; межатомные потенциалы; ГЦК-решетка; бинарные металлические сплавы; вакансионная диффузия.

### Введение

Генетические алгоритмы (ГА) находят широкое применение в материаловедении, вычислительной физике и инженерии благодаря своей способности эффективно решать задачи многомерной оптимизации, где существует множество параметров и ограничений. Их способность находить глобальные минимумы многомерных функций делает их незаменимыми при решении задач, связанных с подбором межатомных потенциалов и структурных параметров сложных систем. Особый интерес представляют исследования, направленные на оптимизацию энергий парных межатомных взаимодействий. По-

добные методики имеют потенциал для обратного проектирования материалов с заданными свойствами, что расширяет горизонты их применения, начиная от материалов для микроэлектроники и заканчивая нанокатализаторами [1, 2].

Упорядоченные бинарные сплавы привлекают внимание благодаря возможности целенаправленного управления их физико-химическими свойствами. Такие исследования усложняются необходимостью учета широкого спектра межатомных взаимодействий, включая координационные окружения больших радиусов, что требует высокого уровня теоретической и вычислительной

подготовки [3]. Применение ГА позволяет эффективно оптимизировать параметры межатомных потенциалов на основе эмпирических и *ab initio* вычислений, обеспечивая достижение энергетически устойчивых состояний. Для этого используются обширные базы данных свойств материалов и численные методы моделирования, включая методы теории функционала плотности (*DFT*) [4, 5].

Дополнительно возможность применения ГА для анализа данных, полученных методами оптической сканирующей или просвечивающей микроскопии, выводит анализ структур на новый уровень. Например, обработка данных решеток в сочетании с использованием пяти координационных сфер позволяет детально исследовать межатомные взаимодействия, минимизируя вычислительные издержки и повышая точность предсказаний [6]. Увеличение радиуса взаимодействий координационных сфер оказывается важным для точного учета низкочастотных фононов, носителей теплопроводности и таких явлений, как граничные дефекты [7].

В данной работе акцент сделан на адаптации ГА к задачам подбора энергий межатомных потенциалов для бинарных упорядоченных сплавов. Специфика использования нескольких координационных сфер позволяет более точно моделировать энергетическую картину сложных систем и учитывать влияние отдаленных межатомных взаимодействий, что важно при исследовании материалов со сложной кристаллической структурой. Такое расширение радиуса взаимодействий в рамках координационных сфер позволяет оптимизировать межатомные потенциалы с учетом метастабильных состояний и динамики фазовых переходов [8, 9].

Примером актуальности оптимизационных подходов является использование ГА для разработки интерпотенциалов для сложных систем, таких как метастабильные сплавы, высокоэнтропийные материалы и функциональные соединения. Современные исследования демонстрируют эффективность совме-

щения ГА с методами машинного обучения и обработкой данных большого объема, что позволяет решать многопараметрические задачи в несколько раз быстрее, чем традиционные подходы [10–13]. Подобный синергетический подход активно используется для прогноза свойств, оптимизации структур и разработки новых материалов [14].

Таким образом, развитие ГА в контексте задач оптимизации межатомных взаимодействий и их применения к заданным решеткам открывает перспективы для фундаментальных исследований и прикладных разработок [15–17]. Эта работа сосредоточена на расширении существующих методов путем введения пяти координационных сфер, что позволяет учесть отдаленные взаимодействия и оптимизировать материалы с точки зрения их потенциального термодинамического поведения.

Упорядочение в металлических сплавах начинается с многотельного взаимодействия атомов различных элементов, в результате которого в кристаллической решетке возникают высокоорганизованные фазовые структуры [16]. На экспериментальном уровне этот процесс детально изучается с помощью рентгеновской и нейтронной дифракции в сочетании с высокоразрешающей электронной микроскопией, что позволяет не только выявить пространственную периодичность упорядоченных фаз, но и охарактеризовать природу дефектных участков [17]. Такие данные становятся отправной точкой для понимания механических и термодинамических свойств упорядочивающихся сплавов [16, 17].

Для описания и предсказания процессов упорядочения на численном уровне необходимо ввести межатомные потенциалы, адекватно отражающие энергетический ландшафт системы. Металлическая связь отличается делокализованным характером, поэтому в модельных расчетах учитывают воздействия нескольких координационных сфер. Уже при включении взаимодействий только в первой и второй сферах, например

с помощью классического потенциала Морзе, удается воспроизводить образование эвтектических, шахматных и полосчатых структур в бинарных системах стехиометрии  $A_3B$ ,  $A_2B_5$  и  $AB$  [18–22]. Подключение более удаленных сфер обогащает набор равновесных структур, однако резко увеличивает объем параметров, подлежащих подбору.

Предположим, что энергия парного взаимодействия задается с точностью до четырех знаков после запятой. При выборе двух координационных сфер ( $i = 1, 2$ ) оптимизируются шесть межатомных потенциалов  $\varphi_{AA}^{(R_i)}$ ,  $\varphi_{BB}^{(R_i)}$  и  $\varphi_{AB}^{(R_i)}$ . Если на каждое значение  $R_i$  приходится 1000 возможных вариантов, то общее число комбинаций параметров равно  $1000^6 = 10^{18}$ . Даже при большой скорости расчета в  $\tau = 10^{-15}$  секунд (фиксированное время выполнения программы на C++) полный перебор займет  $T = 10^{18} \cdot 10^{-15} = 10^3$  секунд  $\approx 0,28$  часа. При расширении задачи до пяти координационных сфер число вариантов растет до порядка  $1000^{15} \approx 10^{45}$ , а суммарное время вычисления составит  $T = 10^{45} \cdot 10^{-15} = 10^{30}$  секунд  $\approx 2,78 \cdot 10^{26}$  часов, что делает прямой перебор совершенно непрактичным.

Для преодоления этой «астрономической» сложности применяют ГА. В основе такого подхода лежит итеративная минимизация аналитического выражения энергии сублимации упорядоченного сплава, записываемой как функция пятнадцати переменных  $\varphi_{AA}^{(R_i)}$ ,  $\varphi_{BB}^{(R_i)}$  и  $\varphi_{AB}^{(R_i)}$  для пяти значений радиусов  $R_i$  координационных сфер. Вместо полного перебора, ГА попеременно осуществляет селекцию, кроссинговер и мутацию «популяции» наборов потенциалов, что обеспечивает эффективный поиск глобального минимума, обходя препятствия в виде локальных минимумов.

Таким образом, предложенный метод не только количественно определяет параметры межатомных потенциалов, но и непосредственно воспроизводит динамику формирования упорядоченных фаз, позволяет оценить пространственную геометрию ми-

кроструктур и масштабируется на системы с большим числом координационных сфер. В работе ставится задача разработать и реализовать ГА для подбора парных межатомных потенциалов на первых пяти координационных сферах по данным модели кристаллической решетки упорядоченной фазы бинарного сплава  $A_nB_m$  с ГЦК-решеткой с последующей верификацией параметров через численное моделирование формирования целевой структуры.

## 1. Методика исследований

Для реализации расчетов и визуализации результатов моделирования было разработано программное обеспечение на языке C++ в виде консольного приложения. Исходный код создавался и компилировался в среде *Microsoft Visual Studio 2019* на платформе *Windows 10*, а вычислительные эксперименты проводились на многопоточном 6-ядерном процессоре *Intel Core i7*. Для визуализации атомных структур и динамики упорядочения использовались разработанные авторами ASCII-графические примитивы, интегрированные в консольное приложение. Данная модульная структура программного обеспечения с поддержкой многопоточности обеспечивает высокую производительность в задачах вычислительного материаловедения.

Настоящее исследование проводилось в два основных этапа, предполагающих поочередное использование ГА для оптимизации межатомных взаимодействий и численного моделирования механизма упорядочения сплава. Такой подход сочетает оптимизационные и динамические методы моделирования, что позволяет как находить оптимальные параметры межатомных потенциалов, так и исследовать эволюцию микроскопической структуры системы при диффузионных процессах.

На первом этапе процедуры задачи были сведены к оптимизации 15 параметров, представляющих межатомные взаимодействия

для пяти первых координационных сфер в многокомпонентной системе. Оптимизация осуществлялась с использованием ГА, эффективной эвристической техники, которая имитирует механизмы естественного отбора и эволюции. Исходная структура алгоритма включает следующие процедуры:

1. *Инициализация.* Формировалась начальная популяция, состоящая из  $n$  псевдослучайно сгенерированных векторов-геномов  $G$ . Каждый вектор описывал набор энергетических взаимодействий  $\varphi_{AA}^{(r)}$ ,  $\varphi_{AB}^{(r)}$  и  $\varphi_{BB}^{(r)}$ , где  $\varphi_{XY}^{(r)}$  представлены в пределах заданного диапазона  $\varphi \in [0,000001; 0,1]$ . Вектора распределялись равномерно по диапазону, что обеспечивало разнообразие начального набора решений. Всего генерируется 1000 таких вариантов, которые записываются в матрицу следующего вида:

$$\begin{matrix} \varphi_1^{(1)} & \varphi_2^{(1)} & \varphi_3^{(1)} & \dots & \varphi_{15}^{(1)} \\ \varphi_1^{(2)} & \varphi_2^{(2)} & \varphi_3^{(2)} & \dots & \varphi_{15}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1^{(1000)} & \varphi_2^{(1000)} & \varphi_3^{(1000)} & \dots & \varphi_{15}^{(1000)} \end{matrix}$$

2. *Функция целевой оптимизации.* Для каждой особи из популяции рассчитывалось значение функции приспособленности  $F(G)$ , определяемой как отрицательная суммарная энергия системы:

$$F(G) = -E_{total}(G),$$

где суммарная потенциальная энергия  $E_{total}(G)$  определялась по формуле:

$$E_{total} = \frac{1}{2N_A} \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} \sum_{r=1}^5 \sum_{S_r(i,j)} \frac{\varphi_{XY}^{(r)}}{R_i}.$$

Здесь  $R_i$  – радиусы координационных сфер, а  $S_r(i,j)$  – множество индексов атомов, расположенных на расстоянии  $R_i$  от атома в узле решетки  $(i,j)$ .

3. *Селекция.* В соответствии с принципами отбора из всей популяции формировались группы лучших особей на основе их значе-

ния функции приспособленности. Например, 40 особей, обладающих минимальными энергиями  $E_{total}$ , отбирались для дальнейшего участия в кроссинговере.

4. *Кроссинговер.* Для каждой пары выбранных особей выполнялся одноточечный кроссинговер. Для скрещивания использовался случайно выбираемый индекс  $k$ , делящий геном на две части. Новые потомки формировались путем комбинирования фрагментов исходных геномов, например:

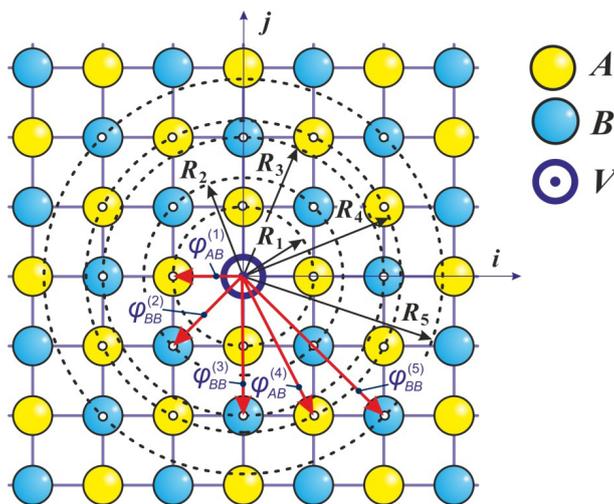
$$G_{HOB} = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k, \varphi'_{k+1}, \dots, \varphi'_{15}).$$

Мера вероятности выполнения кроссинговера задавалась как  $P_c = 1$ , что гарантировало его проведение.

5. *Мутация.* Для дальнейшего повышения разнообразия новых поколений в геномах вводились случайные мутации. Вероятность мутации для каждого гена была выбрана высокой ( $P_m = 0,5$ ) для ускорения сходимости. При мутации значение случайного гена заменялось новым псевдослучайным значением из диапазона  $[0,000001; 0,1]$ .

6. *Оценка и завершение алгоритма.* После каждого цикла кроссинговера и мутации заново вычислялись функции приспособленности для всех новых особей, а популяция обновлялась. Алгоритм завершал свою работу при достижении минимального значения  $E_{total} < E_{min}$  или по истечении заданного числа поколений  $G_{max}$ .

На втором этапе процедуры для исследования эффекта оптимизированных межатомных потенциалов  $\varphi_{XY}^{(Ri)}$  на процесс упорядочения сплава применялся метод Монте-Карло. При этом в качестве механизма диффузии использовался вакансионный механизм [19–22]. Схематически он представлен на рис. 1, где в кристаллической подрешетке центральное положение условно занимает вакансия, в то время как окружающие атомы распределяются по пяти координационным сферам радиусов  $R_i$  ( $i = 1 \dots 5$ ).



**Рис. 1.** Схема вакансионного механизма диффузии с пятью концентрическими координационными сферами радиусов  $R_1 \dots R_5$ , каждая из которых характеризуется соответствующим межатомным потенциалом  $\varphi_{XY}^{(r)}$

**Fig. 1.** Scheme of the vacancy diffusion mechanism with five concentric coordination spheres of radii  $R_1 \dots R_5$ , each of which is characterized by a corresponding interatomic potential  $\varphi_{XY}^{(r)}$

Проведение этого этапа включало следующие процедуры:

7. *Построение расчетной ячейки.* Моделируемая двумерная решетка размером  $N_x \times N_y$  задавалась с использованием периодических граничных условий. Каждая ячейка описывалась состояниями 0 (атом типа A), 1 (атом типа B) и -1 (вакансия). Стартовая конфигурация атомов задавалась случайным образом.

8. *Взаимодействие вакансии–атомы.* В модели учитывались взаимодействия вакансии с ближайшими атомами, сгруппированными в пять координационных сфер с фиксированными радиусами  $R_1 = 1, R_2 = \sqrt{2}, R_3 = 2, R_4 = \sqrt{5}, R_5 = \sqrt{8}$ . Вклад каждой координационной сферы определялся энергетическими параметрами  $\varphi_{XY}^{(r)}$ , которые ранее были оптимизированы в ходе ГА.

9. *Вероятности диффузионных событий.* На каждом шаге выбирались вакансия и ближайший атом, после чего рассчитывалась вероятность  $p_m$  перемещения атома в вакантное место по формуле:

$$p_m = \frac{\exp(-\Delta E_m / (k_B T))}{\sum_{j=1}^5 \exp(-\Delta E_j / (k_B T))},$$

где  $\Delta E_m$  – изменение полной энергии системы при переходе  $m$ -го атома на вакантное место;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура. Критерий Метрополиса используется для принятия решения о реализации атомного перехода: если случайное число из диапазона  $[0, 1]$  меньше  $p_m$ , то атом и вакансия меняются местами.

10. *Эволюция системы.* Процесс повторялся до достижения стационарного состояния (упорядоченной структуры) или исполнения заданного числа итераций. Достоверность упорядочения оценивалась через степень порядка  $\eta$ , которая должна была удовлетворять условию  $\eta \geq \eta_{\min}$ .

11. *Визуализация и анализ.* Полученные результаты моделирования анализировались на предмет достижения упорядоченной структуры, соответствующей минимальной потенциальной энергии. Графическое представление данных использовалось для визуализации динамики процесса и подтверждения теоретических предположений.

Таким образом, методика состоит из двух ключевых этапов. Первый этап – гибкий глобальный поиск оптимальных межатомных потенциалов с помощью ГА. Второй этап –

физически обоснованное динамическое моделирование процесса упорядочения сплава на основе метода Монте-Карло [19–22]. В результате достигается глубокий анализ энергетической картины и механизмов диффузии в двумерных разнородных системах.

## 2. Результаты и их обсуждение

На последующем этапе моделирования с помощью ГА были вычислены оптимальные значения межатомных потенциалов, после чего выполнено моделирование упорядоченных структур на матрице размером 15×40 атомов. Результаты моделирования, представленные на рис. 2 (б, г, е), сравниваются с исходными конфигурациями, рис. 2 (а, в, д). Для количественной оценки точности метода в табл. 1 приведены полученные межатомные потенциалы (в %, с глобальной нормировкой по всем 15 потенциалам) в первых пяти координационных сферах.

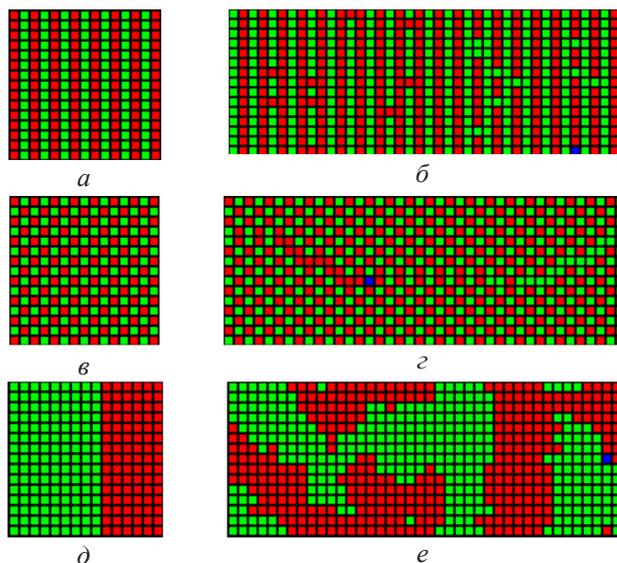
Анализ данных показывает высокую согласованность значений, что свидетельствует о надежности предложенного подхода и возможности учета дальнедействующих взаимодействий вплоть до пятой координационной сферы.

Качественное сравнение структур демонстрирует полное воспроизведение исходных атомных конфигураций в процессе упорядочения. Так, полосчатая структура АВ (рис. 2, а) полностью совпадает с результатом моделирования (рис. 2, б), а шахматная структура АВ (рис. 2, в) точно восстановлена в виде упорядоченной структуры (рис. 2, г). Аналогично, эвтектическая структура, образованная чередующимися слоями фаз А и АВ (рис. 2, д), соответствует структуре эвтектики (рис. 2, е). Подобное совпадение пространственных распределений атомов в структуре подтверждает эффективность используемого алгоритма оптимизации.

**Таблица 1.** Межатомные потенциалы на пяти координационных сферах (в %)

**Table 1.** Interatomic potentials in five coordination spheres (in %)

№		Номер координационной сферы / Coordination sphere number				
		1	2	3	4	5
Рис. 2 (а) / Fig. 2 (а)	$\varphi_{AA}$	7,12	6,60	1,23	4,18	3,30
	$\varphi_{BB}$	0,71	31,76	2,88	20,09	15,88
	$\varphi_{AB}$	3,73	0,31	1,86	0,20	0,16
Рис. 2 (в) / Fig. 2 (в)	$\varphi_{AA}$	37,02	0,0041	0,0755	0,0026	0,0021
	$\varphi_{BB}$	32,27	0,0099	0,0110	0,0062	0,0049
	$\varphi_{AB}$	0,0046	14,34	0,0087	9,07	7,17
Рис. 2 (д) / Fig. 2 (д)	$\varphi_{AA}$	0,43	6,46	1,47	4,09	3,23
	$\varphi_{BB}$	0,14	0,68	0,78	0,43	0,34
	$\varphi_{AB}$	41,44	16,23	5,89	10,27	8,12



**Рис. 2.** Модель атомной структуры сплава состава  $A_n B_m$ ; слева (*a, в, д*) – структуры, для которых проводился расчет энергий упорядочения, справа (*б, з, е*) – структуры, полученные в ходе моделирования по рассчитанным энергиям упорядочения

**Fig. 2.** Model of the atomic structure of the alloy of composition  $A_n B_m$ ; on the left (*a, в, д*) – structures for which the ordering energies were calculated, on the right (*б, з, е*) – structures obtained during the modeling using the calculated ordering energies

Полученные результаты декларируют высокую точность и универсальность предложенного метода. Он позволяет не только точно воспроизводить известные экспериментальные и теоретические структуры упорядочения, но и гибко адаптироваться к анализу более сложных многокомпонентных систем. Существенным преимуществом является вычислительная эффективность: применение ГА снизило время расчета межатомных потенциалов до 3–5 секунд, что в разы превосходит классические методы полного перебора, требующие нескольких часов. Такая производительность и масштабируемость делают данный подход перспективным инструментом для исследования структурных преобразований и энергий взаимодействия в сложных металлических сплавах.

### Выводы

В ходе работы был создан и верифицирован единый алгоритмический подход к подбору значений парных межатомных потенциалов в первых пяти координационных

сферах для стехиометрических бинарных металлических сплавов  $A_n B_m$  с ГЦК решеткой. Главной движущей силой метода стал ГА, обеспечивший эффективный глобальный поиск в огромном пространстве порядка  $10^{45}$  возможных комбинаций параметров, что позволило обойти астрономическую трудоемкость полного перебора. В качестве критерия приспособленности использовалась отрицательная суммарная энергия системы, а применение операторов селекции, одноточечного кроссинговера и мутации гарантировало стабильную сходимость к оптимуму при расчете одного набора параметров за несколько секунд.

Дальнейшая проверка адекватности и точности подобранных межатомных потенциалов проводилась через численное моделирование двумерных решеток размером  $15 \times 40$  атомов при температуре  $100^\circ\text{C}$ . Полученные образцы атомных структур рис. 2 (шахматная, полосчатая и эвтектика) совпали по пространственному распределению атомов с исходными конфигурациями, что

подтвердило физическую обоснованность выбранной модели и корректность оцененных потенциалов.

Компьютерная реализация ГА продемонстрировала многократное превосходство над традиционными методами полного перебора: время подбора оптимальных потенциалов сократилось со многих часов до единиц секунд, при этом сохранялась воспроизводимость и стабильность результатов даже при различных начальных популяциях. Это указывает на высокую прикладную ценность разработанного инструмента для оперативного и надежного анализа межатомных взаимодействий и его готовность к масштабированию на более сложные многокомпонентные системы с большим числом координатных сфер.

В итоге сформированная методика объединяет гибкость и адаптивность глобального поиска ГА с физической строгостью модели межатомных потенциалов, позволяя проводить глубокий энергетический и структурный анализ упорядоченных фаз металлических сплавов. Полученные результаты открывают новые возможности для детального изучения пространственной динамики фазообразования в многокомпонентных системах и целенаправленной разработки материалов с заданными механическими и термодинамическими свойствами.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lin L., Yao S., Zhu Y. et al. Topological design of hexagonal lattice phononic crystals for vibration attenuation combined fast plane wave expansion method with elite seed strategy genetic algorithm // *Results in Physics*. 2024. Vol. 59. Art. 107562. DOI: 10.1016/j.rinp.2024.107562.
2. Li S., Chen W., Jain S., Jung D., Lee J. Optimization of flow behavior models by genetic algorithm: A case study of aluminum alloy // *Journal of Materials Research and Technology*. 2024. Vol. 31. P. 3349–3363. DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.07.048.
3. Asmari N., Neuner L., Weiss R., Mazlounian A., Rosenthal M., Karimi A., Fantner G.E. Data-driven control in atomic force microscopy using a genetic algorithm // *Ultramicroscopy*. 2025. Vol. 275. Art. 114156. DOI: 10.1016/j.ultramicro.2025.114156.
4. Li S., Li S., Liu D., Zou R., Yang Zh. Hardness prediction of high entropy alloys with machine learning and material descriptors selection by improved genetic algorithm // *Computational Materials Science*. 2022. Vol. 205. Art. 111185. DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111185.
5. Xin Y., Cai P., Li P., Qun Y., Sun Y., Qian D., Cheng Sh., Comprehensive analysis of band gap of phononic crystal structure and objective optimization based on genetic algorithm // *Physica B: Condensed Matter*. 2023. Vol. 667. Art. 415157. DOI: 10.1016/j.physb.2023.415157.
6. Kuptamete C., Michalopoulou Z., Aunsri N. A review of efficient applications of genetic algorithms to improve particle filtering optimization problems // *Measurement*. 2024. Vol. 224. Art. 113952. DOI: 10.1016/j.measurement.2023.113952.
7. Ning S., Chen H., Yuan D., Hu W., Huang B. Development of a genetic algorithm based interatomic potential and application in thermal conductivity study of ThO<sub>2</sub> grain boundaries // *Journal of Nuclear Materials*. 2024. Vol. 594. Art. 155035. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2024.155035.
8. Shang X., Liu Z., Zhang J., Luy T., Zou Y. Tailoring the mechanical properties of 3D microstructures: A deep learning and genetic algorithm inverse optimization framework // *Materials Today*. 2023. Vol. 70. P. 71–81. DOI: 10.1016/j.mattod.2023.09.007.
9. Fujii S., Kuwabara A. Interatomic potentials for cubic zirconia and yttria-stabilized zirconia optimized by genetic algorithm // *Computational Materials Science*. 2024. Vol. 233. Art. 112722. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112722.
10. Hobday S., Smith R., BelBruno J. Applications of genetic algorithms and neural networks to interatomic potentials // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: Section B*. 1999. Vol. 153. No. 1–4. P. 247–263. DOI: 10.1016/S0168-583X(99)00057-9.
11. Zhang J., Chen J., Hu P., Wang H. Identifying the composition and atomic distribution of Pt-Au bimetallic nanoparticle with machine learning and genetic algorithm // *Chinese Chemical Letters*. 2020. Vol. 31. No. 3. P. 890–896. DOI: 10.1016/j.ccl.2019.12.006.
12. Khandelwal P., Manna I. Intelligent design of high strength and high conductivity copper alloys using machine learning assisted by genetic algorithm // *Computers, Materials and Continua*. 2024. Vol. 79. No. 1. P. 1727–1755. DOI: 10.32604/cmc.2024.042752.
13. Varela K.N., Pagola G.I., Lund A.M., Ferraro M.B., Orendt A.M., Facelli J.C. An open science grid implementation of the steady state genetic algorithm for crystal structure prediction // *Journal of Computational Science*. 2024. Vol. 82. Art. 102415. DOI: 10.1016/j.jocs.2024.102415.

14. Bekku H., Noda Y., Sueoka K. Genetic-algorithm-combined density functional theory calculations for investigating atomic properties of Si-Ge alloys // *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2024. Vol. 182. Art. 108727. DOI: 10.1016/j.mssp.2024.108727.
15. Nguyen M.C., Zhao X., Wang Y., Wang C., Ho K. Genetic algorithm prediction of crystal structure of metastable Si-IX phase // *Solid State Communications*. 2014. Vol. 182. P. 14–16. DOI: 10.1016/j.ssc.2013.12.005.
16. Ramachandran S., Jayalal M.L., Vasudevan M. Das S., Jehadeesan R. Combining machine learning techniques and genetic algorithm for predicting run times of high performance computing jobs // *Applied Soft Computing*. 2024. Vol. 165. Art. 112053. DOI: 10.1016/j.asoc.2024.112053.
17. Liu K., Zhang R., Zhang S., Chang Y., Li M., Wang Y., Liu Q., Yu D. Composition design of high-performance copper alloy by coupling artificial neural network and genetic algorithm // *Computational Materials Science*. 2023. Vol. 229. Art. 112449. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112449.
18. Khalikov A.R., Sharapov E.A., Semenov A.S., Valitov V.A., Dmitriev S.V. Modeling structure of VKNA-25 and EP975 heat-resistant alloys by Monte-Carlo method // *Basic Problems of Materials Science*. 2019. Vol. 16(4). P. 429–436. (In Russian) [Халиков А.Р., Шарапов Е.А., Семенов А.С., Валитов В.А., Дмитриев С.В. Моделирование структуры жаропрочных сплавов ВКНА-25 и ЭП975 методом Монте-Карло // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2019. Т. 16(4). С. 429–436]. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.04.001.
19. Khalikov A.R., Sharapov E.A., Korznikova E.A., Valitov V.A., Dmitriev S.V. On the simplified procedure for describing all possible structures of the binary alloy AnBm // *Basic Problems of Materials Science*. 2018. Vol. 15(4). P. 482–488. (In Russian) [Халиков А.Р., Шарапов Е.А., Корзникова Е.А., Валитов В.А., Дмитриев С.В. Об упрощенной процедуре описания всех возможных структур бинарного сплава AnBm // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2018. Т. 15(4). С. 482–488]. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2018.04.005.
20. Khalikov A.R., Nguyen V.T., Valitov V.A. Description of all possible structures of the stoichiometric composition A<sub>3</sub>BC on FCC lattice // *Basic Problems of Materials Science*. 2020. Vol. 17(4). P. 488–494. (In Russian) [Халиков А.Р., Нгуен В.Т., Валитов В.А. Описание всех возможных структур стехиометрического состава A<sub>3</sub>BC на ГЦК решетке // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2020. Vol. 17(4). P. 488–494]. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2020.04.013.
21. Lobzenko I.P., Khalikov A.R., Sharapov E.A., Korznikova E.A., Semenov A.S., Dmitriev S.V. Monte-Carlo simulation of the process of diffusion welding of two metals through a gasket // *Basic Problems of Materials Science*. 2019. Vol. 16(1). P. 47–54. (In Russian) [Лобзенко И.П., Халиков А.Р., Шарапов Е.А., Корзникова Е.А., Семенова А.С., Дмитриев С.В. Моделирование методом Монте-Карло процесса диффузионной сварки двух металлов через прокладку // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2019. Т. 16(1). С. 47–54]. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.01.007.
22. Khalikov A.R., Sharapov E.A., Korznikova E.A., Potekaeв A.I., Starostenkov M.D., Galieva E.V., Dmitriev S.V. Monte Carlo simulation of diffusion processes in three-component alloys // *Izvestiya vuzov. Fizika*. 2019. Vol. 62(4). P. 119–124. (In Russian) [Халиков А.Р., Шарапов Е.А., Корзникова Е.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Галиева Е.В., Дмитриев С.В. Моделирование методом Монте-Карло процессов диффузии в трехкомпонентных сплавах // *Известия вузов. Физика*. 2019. Т. 62(4). С. 119–124]. DOI: 10.17223/00213411/62/4/119.