

XVI Забабахинские научные чтения
29 мая – 2 июня 2023 г. Снежинск

**РАЗРАБОТКА ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ
МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ НА
ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ AL-
СТРУКТУР**

Панченко Б.А. Майер А.Е.
ЧелГУ, Челябинск

Межатомные потенциалы

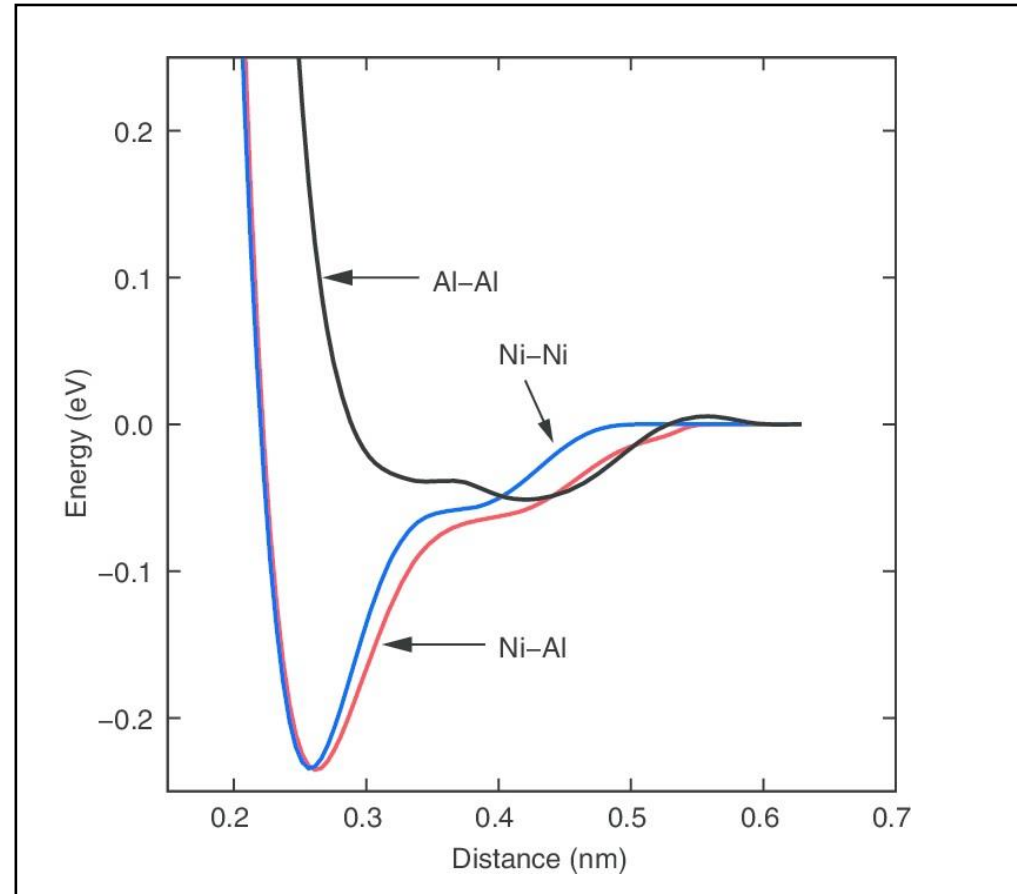


Рис.1 EAM потенциал для Ni-Al структур [1]

1. Pun, G. & Mishin, Y.. (2009). Development of an interatomic potential for the Ni-Al system. Philosophical Magazine. 89. 3245-3267. 10.1080/14786430903258184.

Потенциалы машинного обучения

- Метод непараметрических потенциалов можно разбить на несколько составляющих:
 - Подбор данных с атомными структурами с соответствующими энергиями и силами (обучающая выборка).
 - Выбор «эффективных» координат (дескрипторов) – функций описывающих окружение атома.
 - Выбор регрессионного алгоритма, для работы с соответствующими координатами и обучающими данными.

Потенциалы на основе нейронных сетей

- Регрессионная модель: нейронная сеть.

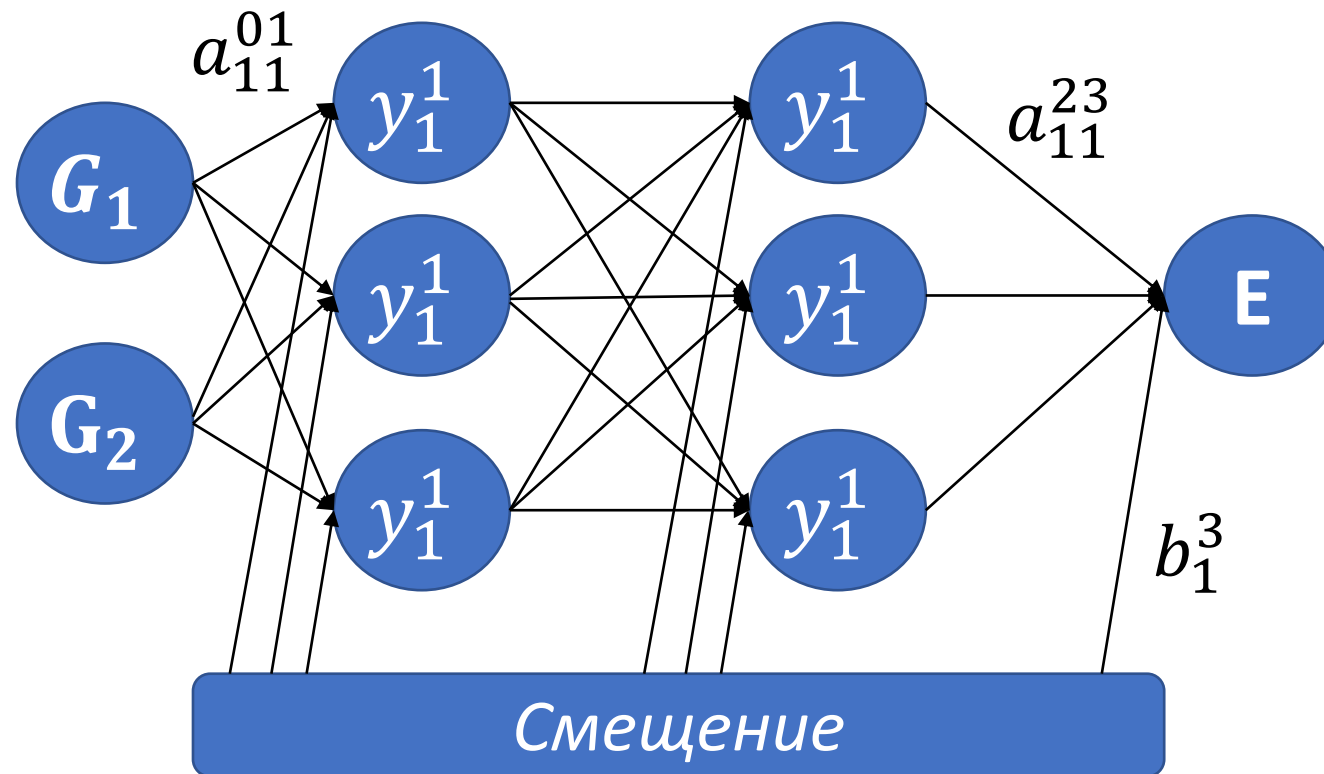


Рис.2 «Атомная» нейронная сеть. Случай потенциала нейронной сети с двумя функциями описания окружения атома и двумя скрытыми слоями.

Функции симметрии Белера-Парринелло

Функции симметрии предложенные Беллером и Парринелло[2]:

$$f_c = \begin{cases} 0.5 \cdot \left(\cos \left(\frac{\pi \cdot R_{ij}}{R_c} \right) + 1 \right), & \text{для } R_{ij} \leq R_c \\ 0, & \text{для } R_{ij} > R_c \end{cases} \quad (1),$$

$$G_i^{\text{atom,rad}} = \sum_{j=0}^{N \text{ atom}} e^{-\eta(R_{ij}-R_s)} \cdot f_c(R_{ij})$$

$$(2),$$

$$G_i^{\text{atom,ang}} =$$

$$= 2^{1-\zeta} \sum_{j,k \neq i}^{\text{all}} (1 + \lambda \cos \theta_{ijk}) \cdot \zeta \quad (3).$$

$$\cdot e^{-\eta(R_{ij}^2 + R_{ik}^2 + R_{jk}^2)} \cdot f_c(R_{ij}) \cdot f_c(R_{ik}) \cdot f_c(R_{jk})$$

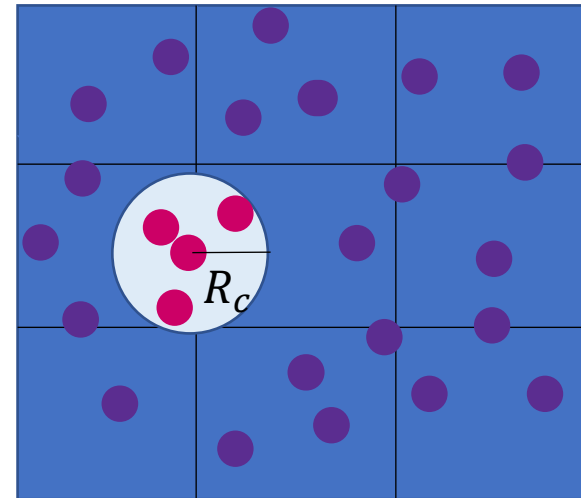


Рис.3 Схематическое изображение сферы функции обрезки, для центрального атома.

Обучающая выборка

- Структуры Al, Cu, Al-Cu сплавов, взятые из открытых источников OQMD [3], The Materials Project [4], The Bilbao Crystallographic Server [5], Materials Cloud [6].
- Ab initio расчёты методом теории функционала плотности с помощью ПО Quantum ESPRESSO [7]. Управление и структурирование расчётами Aiida[8]
- Для всех структур расчёты производились на плоских волнах с использованием псевдопотенциалов SSSP[9].
- Были проведены SCF(самосогласующиеся поле) расчёты, расчёты ионной динамики, расчёты Al-Cu суперячеек.

3. Saal, J. E., Kirklin, S., Aykol, M., Meredig, B., and Wolverton, C. "Materials Design and Discovery with High-Throughput Density Functional Theory: The Open Quantum Materials Database (OQMD)", JOM 65, 1501-1509 (2013)

4. Jain A. et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation //APL materials. – 2013. – Т. 1. – №. 1. – С. 011002.

5. Aroyo M. I. et al. Crystallography online: Bilbao crystallographic server //Bulg. Chem. Commun. – 2011. – Т. 43. – №. 2. – С. 183-197.

6. Talirz L. et al. Materials Cloud, a platform for open computational science //Scientific data. – 2020. – Т. 7. – №. 1. – С. 299.

7. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials //Journal of physics: Condensed matter. – 2009. – Т. 21. – №. 39. – С. 395502.

8. Pizzi G. et al. AiiDA: automated interactive infrastructure and database for computational science //Computational Materials Science. – 2016. – Т. 111. – С. 218-230.

9. SSSP: G. Prandini, A. Marrazzo, I. E. Castelli, N. Mounet and N. Marzari, npj Computational Materials 4, 72 (2018).

Структура Al-Cu потенциала

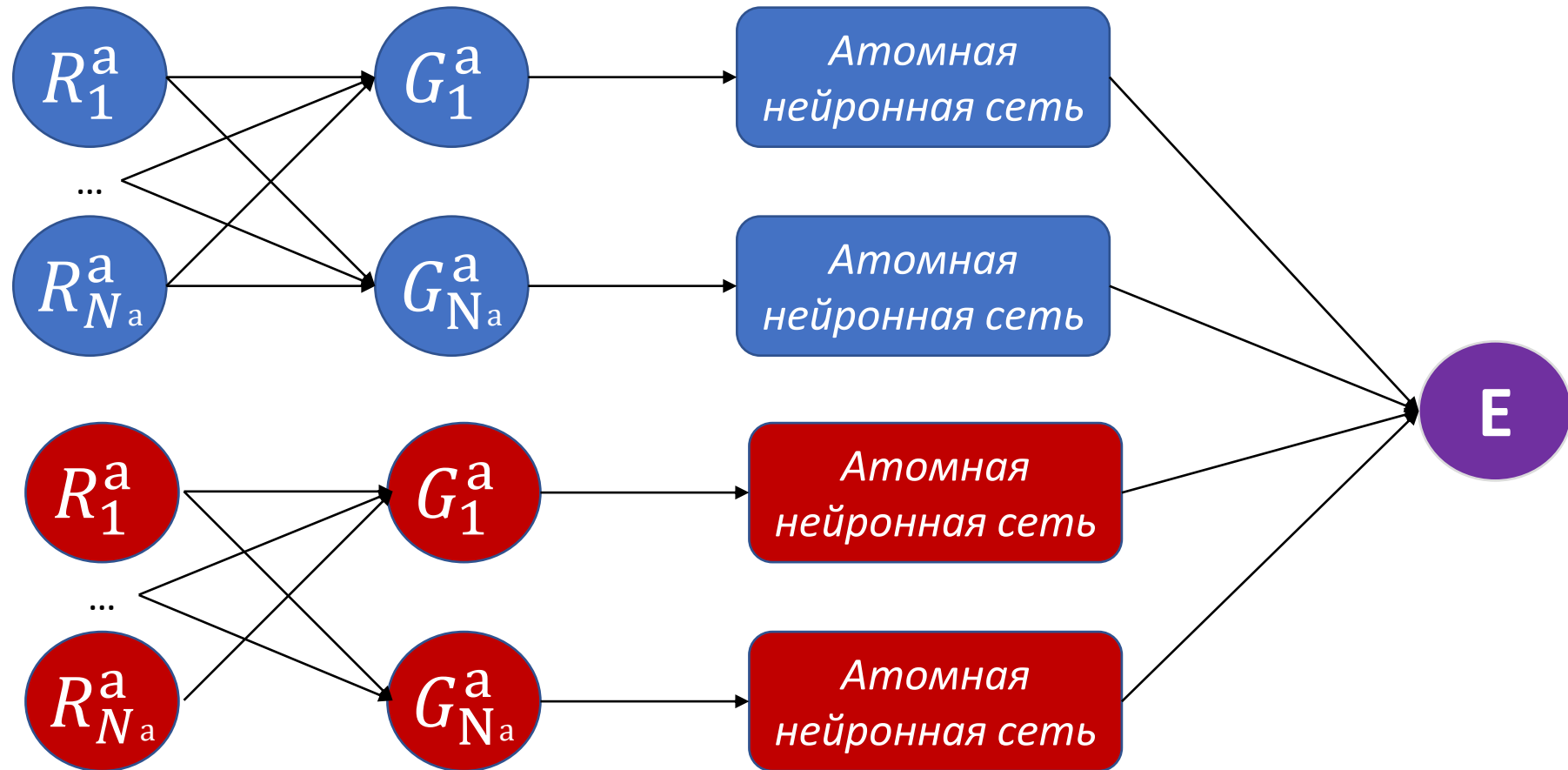


Рис.4 Схематичное изображение потенциала для Al-Cu сплавов, синим обозначена подструктура для алюминия, красным для меди.

Параметры потенциала

- Дескриптор состоит из функции радиальной симметрии и функции обрезки в виде \cos .
- По два скрытых слоя в атомной части.
- Двадцать узлов в каждом скрытом слое для каждого типа атомов.
- Функция активации ReLU.
- Среднеквадратическая ошибка, как функция потерь, для энергий и сил.

Обучение

- Обучение происходило с помощью n2p2[10] фреймворка.
- 550 структур для обучения.
- Данные были нормализованы и «масштабированы».
- 15 % от обучающей выборки является тестовой выборкой.

Результаты

- Средняя относительная ошибка на структурах обучения
 - Энергии
 - AL 6%
 - Cu 13%
 - Сил
 - AL 27%
 - Cu 34%
- Применен, как межатомный потенциал в LAMMPS[11].

Спасибо за внимание!