



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Искусственный интеллект в теоретическом материаловедении

Дремов В.В.

Планирование дорогостоящих экспериментов – оптимизация постановки, прогноз результатов, тестирование моделей

Прогнозирование изменения свойств со временем – радиационное, термическое старение

Дрейф технологий – изменение свойств материалов

Получение данных в областях фазовой диаграммы, недоступной для эксперимента

Создание материалов с заданными свойствами

Информатика материалов

Базы данных +
искусственный интеллект

Основной источник
наполнения баз данных



Многомасштабное моделирование

Квантовая теория +
Атомистическое моделирование +
Континуальные модели

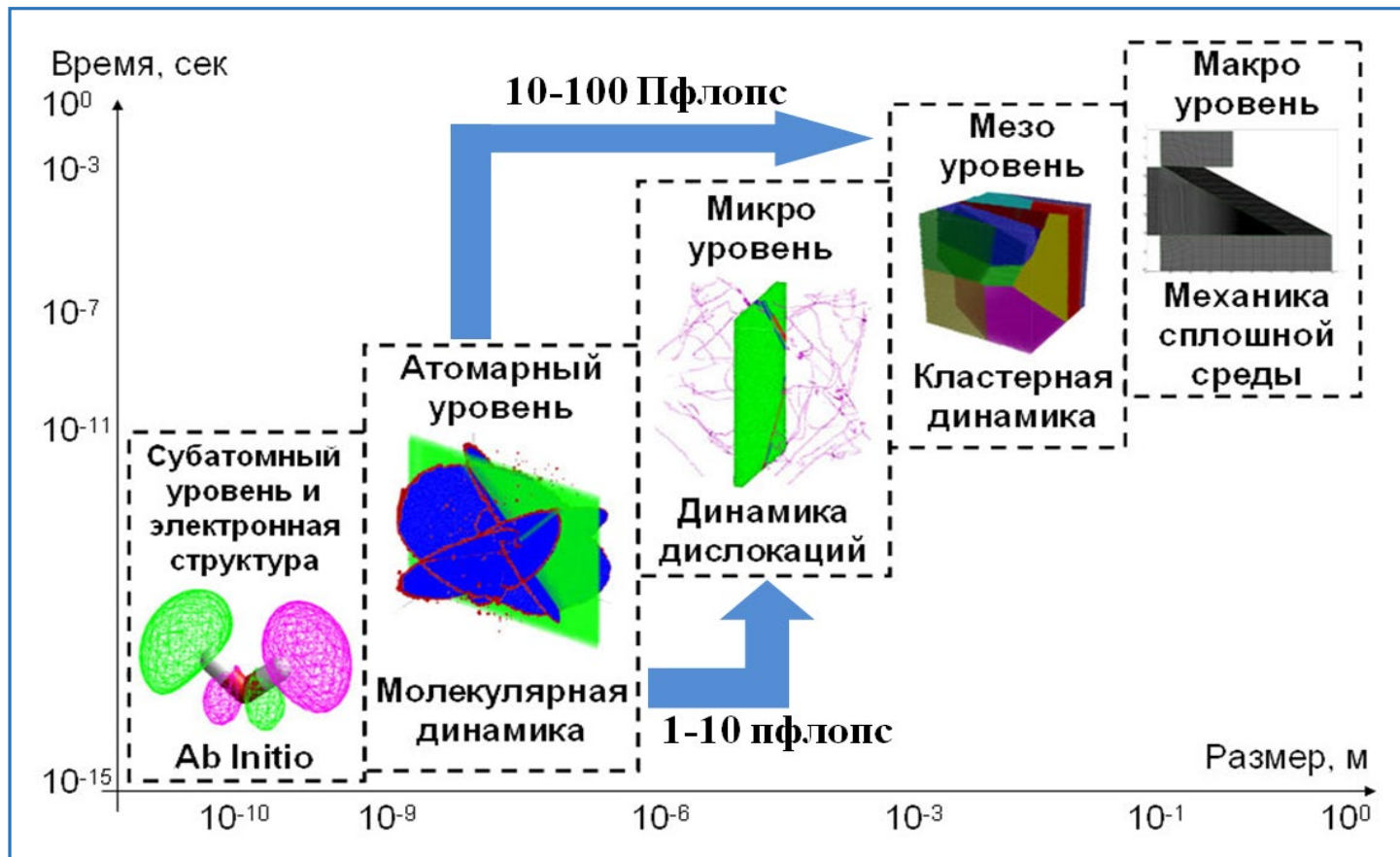
- (+) Нет необходимости построения физически обоснованных моделей
- (+) Можно быстро получить результат
- (-) Отсутствие однородных баз данных
- (-) Низкая предсказательная способность

- (+) Отсутствие эмпирических параметров
- (+) Полнота описания свойств
- (-) Долгий процесс калибровки расчетной технологии для выбранного класса материалов
- (-) Большие вычислительны затраты

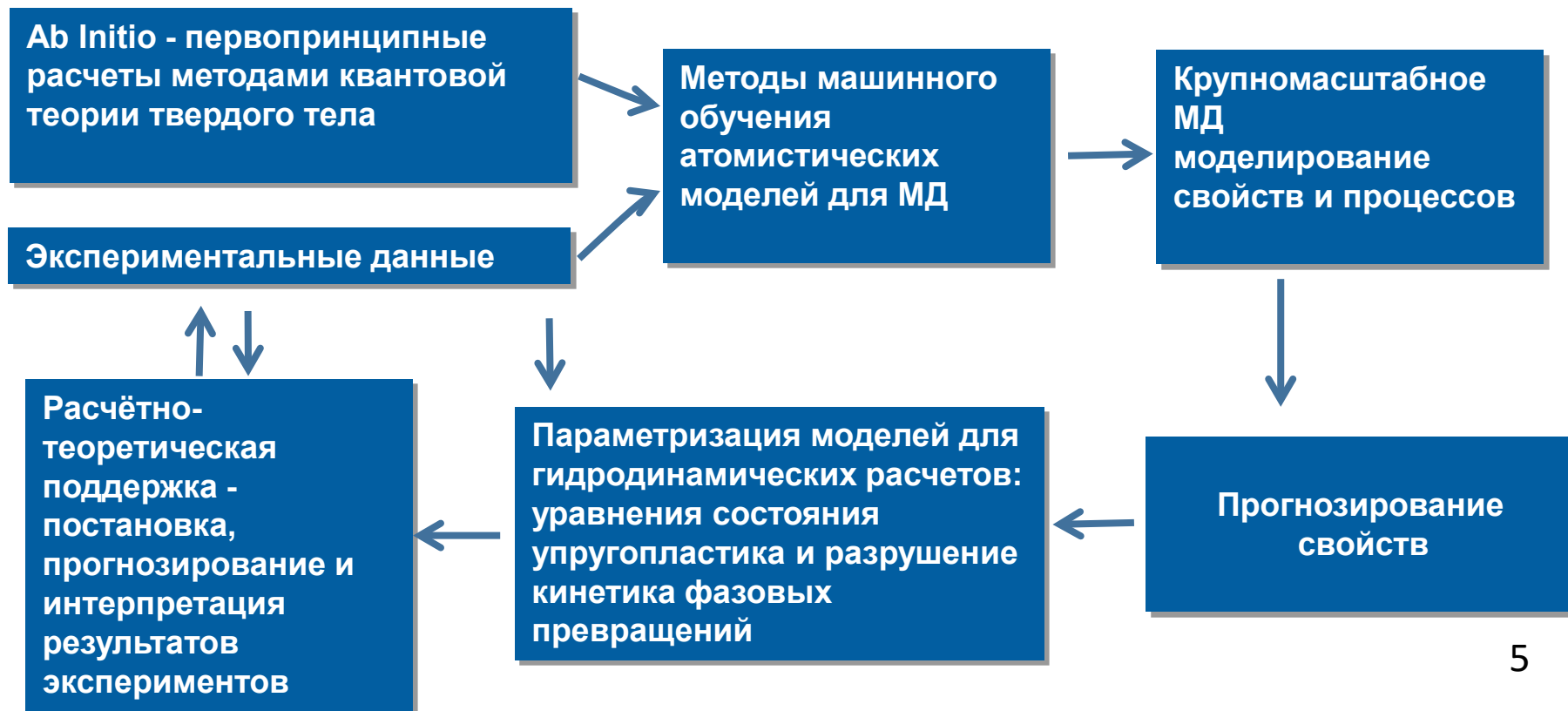
Иерархия моделей материалов



РФЯЦ-ВНИИФ
РОСАТОМ



Компьютерное моделирование свойств материалов в РФЯЦ-ВНИИТФ



Атомистическое моделирование



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Первопринципное моделирование на основе DFT		Моделирование методом классической МД	
Доступные размеры моделируемых систем			
< 1000 атомов		~ 10⁹ атомов (для потенциалов типа МПА) ~ 10⁸ атомов (для ММПА/ОМПА потенциалов) ~ 10⁷ атомов (для машинно-обучаемых потенциалов типа MTP/GAP/SNAP)	
Возможные результаты расчетов			
<u>Свойства материалов</u>	- Уравнения состояния - Фононные спектры - Фазовая стабильность - Диффузия и вязкость в жидкостях - Характеристики точечных дефектов - Обучающие выборки (энергии и силы) для параметризации потенциалов для КМД в т.ч. машинно-обучаемых - ...	- Статические и динамические прочностные свойства - Кинетика фазовых превращений - Характеристики образования и движения линейных и плоских дефектов - Формирование межзеренных границ - Перекристаллизация - Радиационная стойкость - ...	<u>Процессы в материалах</u>

Роль MLIP (Machine Learning Interatomic Potentials)

**Квантовые
расчеты
(DFT + QMD)**
(построение
обучающей
выборки)

**VASP, Abinit,
QE, Exciting**



**Машинное
обучение**
(построение MLIP
моделей
межатомного
взаимодействия)

**GEAM, MTP,
GAP, SNAP**



**Методики
крупномасштабного
атомистического
моделирования (КМД)**
(моделирование свойств и
процессов
представительных систем)

**LAMMPS
МОЛОХ**

- + высокая точность
- + “отсутствие” подгоночных параметров
- малость систем

- + Достижение в КМД расчете точности DFT
- + Возможность дообучения “на лету”
- *ab initio* расчет – истина?!

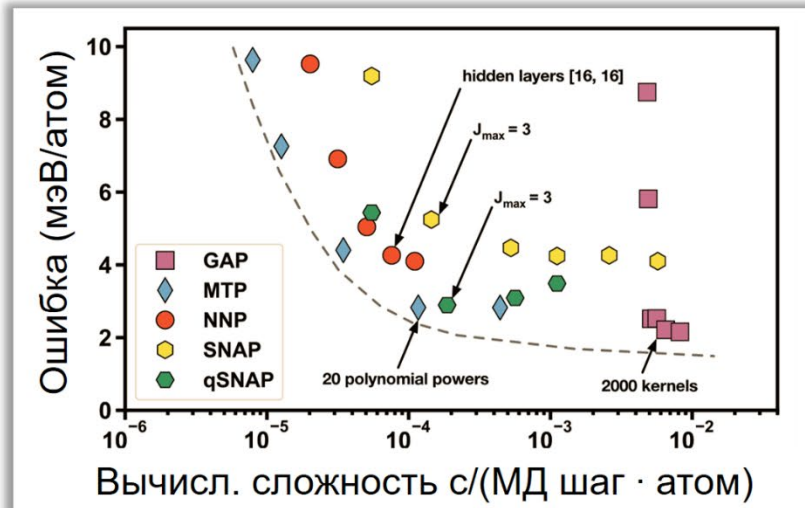
- + большие системы
- точность определяется полужемпирической моделью межатомного взаимодействия

Машинно-обученные межатомные потенциалы для молекулярной динамики



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Соотношение точность-быстродействие для МО-потенциалов



Ошибка (мэВ/атом)

GAP	0.62	0.60	0.75	3.01	4.49	4.02
MTP	0.66	0.52	0.73	3.53	3.24	4.46
NNP	2.38	2.13	1.24	6.06	10.84	11.27
SNAP	1.59	1.04	1.39	8.45	8.10	11.82
qSNAP	0.82	1.41	1.10	4.68	6.99	10.44
	Ni	Cu	Li	Mo	Si	Ge

Ошибка обучения

Тестовая ошибка

- Масштабируемость $O(N)$ против $O(N^3)$ у DFT
- Способны показывать точность DFT
- Требуют тщательной валидации по экспериментальным свойствам
- В 100-1000 раз медленнее классических потенциалов (EAM, MEAM)

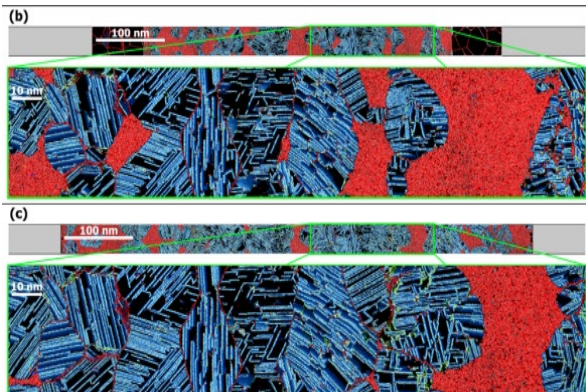
Y. Zuo, C. Chen, X. Li, Performance and Cost Assessment of Machine Learning Interatomic Potentials // J. Phys. Chem. A 2020

Свойства и процессы



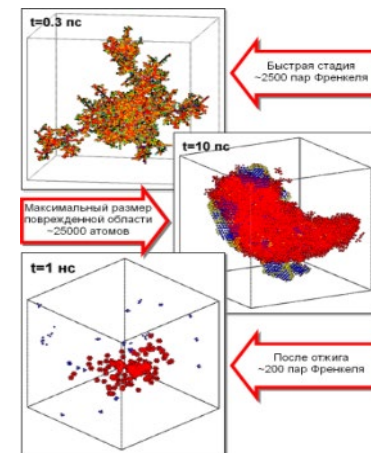
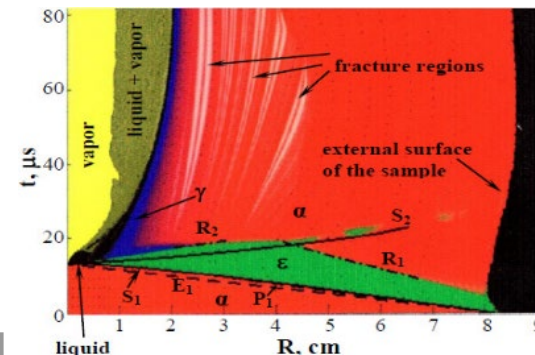
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Уравнения состояния и транспортные свойства в условиях высокой концентрации энергии



Упругопластика и кинетика фазовых превращений при высоких скоростях деформации, формирование микроструктуры

Радиационная стойкость конструкционных материалов и радиационное старение ядерно-активных материалов



Расчет термодинамических потенциалов

1. Квазигармоническое приближение (Холодные фононы)

$$F_{harm} = \int_0^{\omega_{max}} \left[\frac{\hbar\omega}{2} + k_B T \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) \right) \right] g(\omega) d\omega$$

2. Зависящий от температуры эффективный потенциал (TDEP)

$$U_{TDEP} = U_0 + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} \Phi_{ij}^{\alpha\beta} u_i^\alpha u_j^\beta + \frac{1}{3!} \sum_{ijk} \sum_{\alpha\beta\gamma} \Phi_{ijk}^{\alpha\beta\gamma} u_i^\alpha u_j^\beta u_k^\gamma + \frac{1}{4!} \sum_{ijkl} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \Phi_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} u_i^\alpha u_j^\beta u_k^\gamma u_l^\delta + \dots$$

3. Метод термодинамического интегрирования

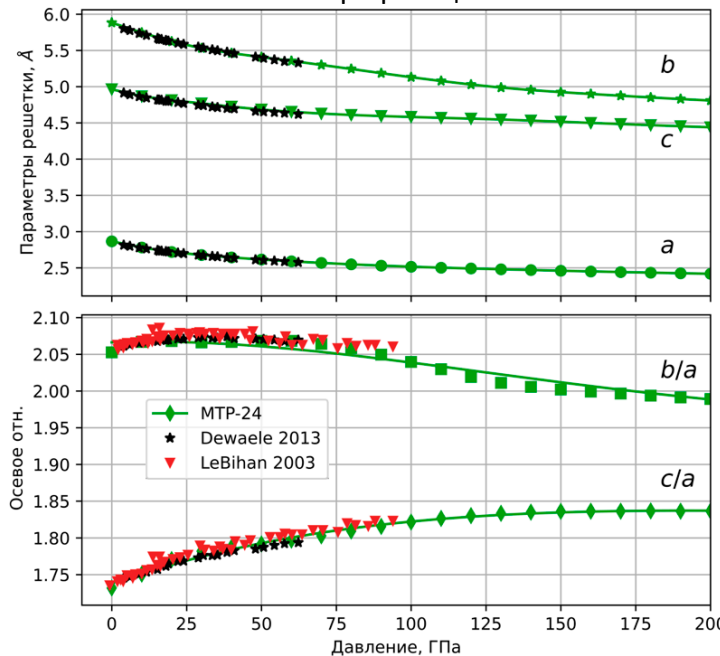
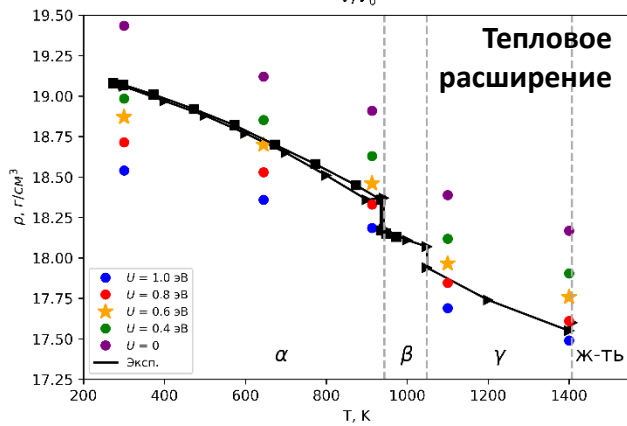
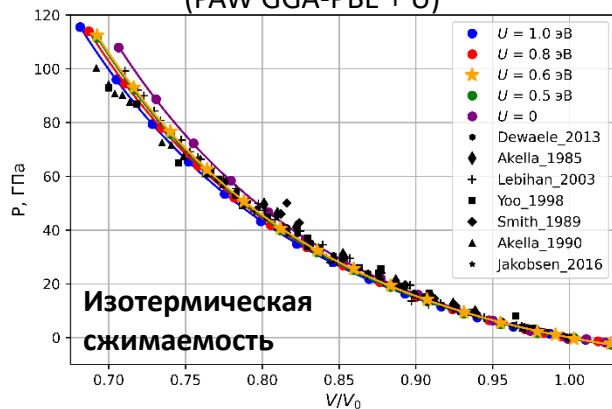
$$F(\lambda=1, V, T) = F(\lambda=0, V, T) + \int_0^1 d\lambda \langle U_{II} - U_I \rangle_\lambda$$

Уран. QMD + MLIP (Moment Tensor Potential – MTP)

Выбор AIMD приближения на основе доступных
экспериментальных данных
(PAW GGA-PBE + U)



Построение машинно-обученных потенциалов на
результатах AIMD расчетов
и их верификация



Параметры ячейки орторомбической α -фазы вдоль изотермы T $\approx$ 300 К

Moment Tensor Potentials (MTP):

Shapeev A., Multiscale Modeling and Simulations **14**, 1153 (2016)

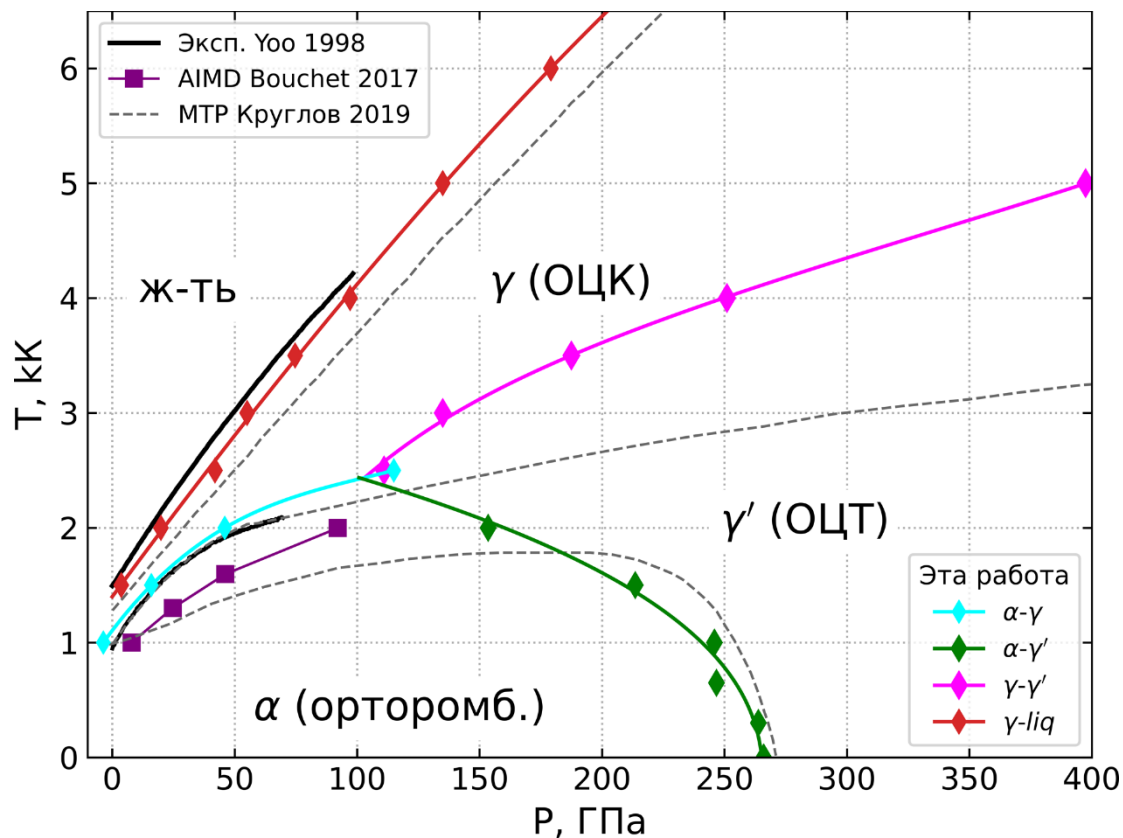
Shapeev A., Comp.Mat.Sci., **139**, 26 (2017)

Podryabinkin E., Shapeev A., Comp.Mat.Sci., **140**, 171 (2017)

Расчётная фазовая диаграмма урана



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Yoo et al. Phys.Rev.B **57**, 10362 (1998)
Kruglov et al. Phys.Rev.B **100**, 174104 (2019)

Bouchet et al. Phys.Rev.B **95**, 054113 (2017)
Настоящая работа готовится к публикации.

МД расчет вязкости

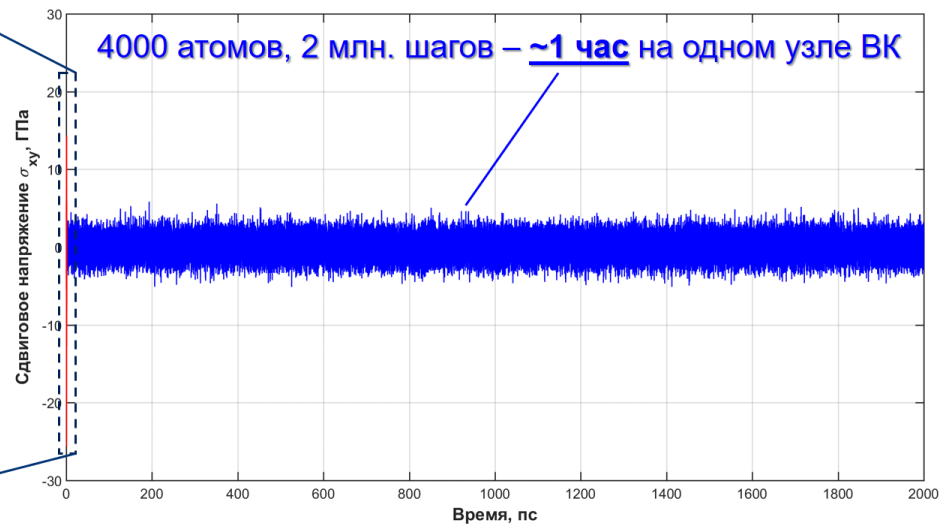


РФЯЦ-ВНИИФ
РОСАТОМ

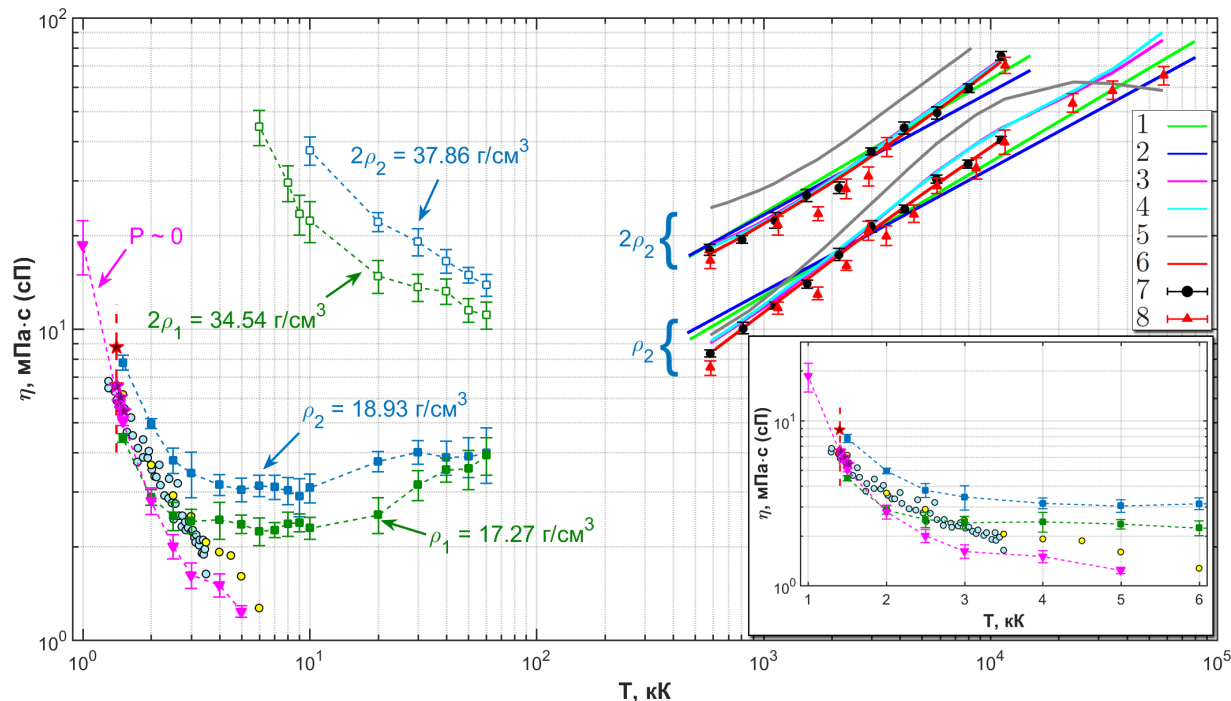
Динамическую вязкость при различных плотностях и температурах рассчитаем с помощью соотношения Кубо-Грина через автокорреляционную функцию сдвиговых напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$

$$\eta = \frac{1}{3TV} \int_0^{\infty} dt \sum_{\alpha < \beta} \langle \sigma_{\alpha\beta}(t) \sigma_{\alpha\beta}(0) \rangle,$$

где α и β – декартовы координаты. Значения $\sigma_{\alpha\beta}(t)$ получались на статистически независимых МД траекториях в NVT расчетах для жидкости.



Вязкость урана



1–7 – Фальков А.Л. и др., **Метод псевдоатомной молекулярной динамики** для расчета коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии плотной плазмы, ЖЭТФ, 2022, том 161, вып. 3, стр. 438-452; Фальков А.Л., Структурные и теплофизические свойства плотного ионизированного вещества с учетом кулоновских корреляций, дисс. канд. физ.-мат. наук, РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск – 2024.

8 – Kress J. D., Cohen J. S., Kilcrease D. P. et al. **Orbital-free molecular dynamics** simulations of transport properties in dense-plasma uranium // High Energy Density Physics. – 2011. – Vol. 7. – pp. 155 – 160.

Звезды – экспериментальные измерения вязкости жидкости при $P \sim 0$ – D. Ofte, The Viscosities of Liquid Uranium, Gold and Lead, J. Nucl. Mater., 22 (1967) 28-23; Wittenberg, L.J, A Model for Liquid Uranium and Plutonium with Implications on the Adjacent Solid Phases, in Plutonium 1975 and Other Actinides. Proc. 5th Int. Conf. on Plutonium and Other Actinides, Blank, H. and Linder, R., Eds., Baden-Baden: North-Holland Publishers, 1976, p. 71.

Цветные окружности – Классическая молекулярная динамика: вязкость жидкости при $P \sim 0$ – D.K. Belashchenko, D.E. Smirnova, O.I. Ostrovski, 2010, Teplofizika Vysokikh Temperatur, 2010, Vol. 48, No. 3, pp. 383–395; J. Tranchida et al., Thermophysical properties and unexpected viscosity of liquid (U, Zr): An atomistic investigation, J. Chem. Phys. 160, 214507 (2024).

Остальные символы – КМД с МТР потенциалом, обученным по QMD расчетам (WASP) – изохоры и изобара $P \sim 0$ – настоящая работа.

Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами 2025-2030

Глобальная цель: Построение виртуальной модели новых, материалов, обладающей прогностическими способностями

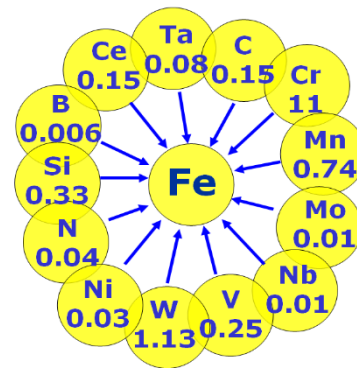
Главные проблемы:

1) Многокомпонентность

Например, стали содержат ~ 10 значимых компонент;
при увеличении числа компонент точность моделирования падает

Решение

Совершенствование машинно-обучаемых потенциалов, включая магнитные свойства



ФМ стальЭК-181

Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами 2025-2030



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

2. Проблема с классической ТФП

Свойства многих материалов (электриды, низкоразмерные магнетики, материалы со спин-жидкостным состоянием) для «технологий послезавтрашнего» дня определяются сильными электронными корреляциями, расчетно-теоретические методы для которых недостаточно развиты

Решение

Качественная модернизация цифровых инструментов материаловедения для достижения технологического лидерства в создании принципиально новых конструкционных и функциональных материалов

Цепочка усложнений



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

DFT

Электрон в
среднем поле

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i f(\varepsilon_i) |\psi_i(\mathbf{r})|^2$$



Основное
невозбужденное
состояние

DMFT

Локальное
взаимодействие между
электронами

Функция Грина (амплитуда вероятности
создания электрона со спином, на узле i в
момент времени t'):

$$G_{i\sigma}(\tau - \tau') \equiv -\langle c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger(\tau') \rangle$$

$$G[\Delta(\omega)] = \sum_k \{ \omega - \Sigma[\Delta(\omega)] - t_k \}^{-1}$$

СЭЧ (частотно зависимый потенциал):

$$\Sigma[\Delta(\omega)] \equiv \Delta(\omega) - 1/G[\Delta(\omega)] + \omega$$

Гибридационная функция:

$$\Delta(\omega) = \sum_v \frac{|V_v|^2}{\omega - \varepsilon_v^{\text{bath}}}$$



Возбужденное
коррелированное
состояние

Квантовые многочастичные
эффекты

Плавный переход металл-изолятор

Температурная магнитная
восприимчивость

Температурные эффекты в
электронной подсистеме

Возникновение и локализация
магнитных моментов

Перенормировка массы
носителей заряда

Кондо-эффект

Парамагнитное неупорядоченное
состояние

...

Для каких материалов важно



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

ПЕРИОДЫ	РЯДЫ	ГРУППЫ ЭЛЕМЕНТОВ														VIII					
		I	II	III	IV	V	VI	VII													
1	1	H Hydrogenium Водород	ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА														He Helium Гелий	Символ элемента Относительная атомная масса Порядковый номер Sn Stannum Олово Название элемента			
2	2	Li Lithium Литий	Be Beryllium Бериллий	B Borum Бор	C Carboneum Углерод	N Nitrogenium Азот	O Oxygenium Кислород	F Fluorum Фтор	Ne Neon Неон												
3	3	Na Natrium Натрий	Mg Magnesium Магний	Al Aluminium Алюминий	Si Silicium Кремний	P Phosphorus Фосфор	S Sulfur Сера	Cl Chlorium Хлор	Ar Argon Аргон												
4	4	K Kalium Калий	Ca Calcium Кальций	Sc Scandium Скандий	Ti Titanium Титан	V Vanadium Ванадий	Cr Chromium Хром	Mn Manganum Марганец	Fe Ferrum Железо	Co Cobaltum Кобальт	Ni Niccolum Никель										
	5	Cu Cuprum Медь	Zn Zincum Цинк	Ga Gallium Галлий	Ge Germanium Германий	As Arsenicum Мышьяк	Se Selenium Селен	Br Bromum Бром	Kr Krypton Криптон												
5	6	Rb Rubidium Рубидий	Sr Strontium Стронций	Y Yttrium Иттрий	Zr Zirconium Цирконий	Nb Niobium Ниобий	Mo Molybdaenum Молибден	Tc Technetium Технеций	Ru Ruthenium Рутений	Rh Rhodium Родий	Pd Palladium Палладий										
	7	Ag Argentum Серебро	Cd Cadmium Кадмий	In Indium Индий	Sn Stannum Олово	Sb Stibium Сурьма	Te Tellurium Теллур	I Iodum Йод	Xe Xenon Ксенон	s-элементы p-элементы											
6	8	Cs Cesium Цезий	Ba Barium Барий	La* Lanthanum Лантан	Hf Hafnium Гафний	Ta Tantalum Тантал	W Wolframium Вольфрам	Re Rhenium Рений	Os Osmium Осмий	Ir Iridium Иридий	Pt Platinum Платина										
	9	Au Aurum Золото	Hg Hydrargyrum Ртуть	Tl Thallium Таллий	Pb Plumbum Свинец	Bi Bismuthum Висмут	Po Polonium Полоний	At Astatium Астат	Rn Radon Радон	d-элементы f-элементы											
7	10	Fr Francium Франций	Ra Radium Радий	Ac** Actinium Актиний	Rf Rutherfordium Резерфордий	Db Dubnium Дубний	Sg Seaborgium Сиборгий	Bh Bohrium Борий	Hs Hassium Хассий	Mt Meitnerium Мейтнерий											
ВЫСШИЕ ОКСИДЫ		R ₂ O	RO	R ₂ O ₃	RO ₂	R ₂ O ₅	RO ₃	R ₂ O ₇	RO ₄												
ЛЕГУЧЕ В ВОДОРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ					RH ₄	RH ₃	RH ₂	RH													
ЛАНТАНОИДЫ*		Ce Cerium Церий	Pr Praseodymium Прометий	Nd Neodymium Неодим	Pm Promethium Прометий	Sm Samarium Самарий	Eu Europium Европий	Gd Gadolinium Гадолиний	Tb Terbium Тербий	Dy Dysprosium Диспрозий	Ho Holmium Гольмий	Er Erbium Эрбий	Tm Thulium Тулий	Yb Ytterbium Иттербий	Lu Lutetium Лютеций						
АКТИНОИДЫ**		Th Thorium Торий	Pa Protactinium Протактиний	U Uranium Уран	Np Neptunium Нептуний	Pu Plutonium Плутоний	Am Americium Америций	Cm Curium Кюрий	Bk Berkelium Берклий	Cf Californium Калифорний	Es Einsteinium Эйнштейний	Fm Fermium Фермий	Md Mendelevium Менделевий	No Nobelium Нобелий	Lr Lawrencium Лоуренсий						

4f

5f

Требуемые вычислительные ресурсы



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

	5 Пфлопс	20 Пфлопс	100 Пфлопс
3d (группа железа) Чистые вещества	Электронная структура + Термодинамика		
3d (группа железа) Многокомпонентные вещества N>3	Электронная структура	Электронная структура + термодинамика	
4f (Лантаниды)	Электронная структура	Электронная структура + Термодинамика	
5f (Актиниды)		Электронная структура	Электронная структура + Термодинамика



Машинно-обученные модели
взаимодействия MLIP