РАСЧЕТ ВЯЗКОСТИ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННО-ОБУЧЕННЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

П. В. Чирков, Г. С. Ельцов, В. В. Дремов, А. В. Караваев

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

Благодаря развитию вычислительных мощностей и технологий искусственного интеллекта в последние несколько лет широкое использование получил подход по разработке полуэмпирических потенциалов для классического молекулярно-динамического (КМД) моделирования с использованием алгоритмов машинного обучения и т.н. машинно-обученных межатомных потенциалов (Machine-Learning Interatomic Potential – MLIP). В рамках этого подхода потенциалы для описания межатомных взаимодействий строятся не в виде физически обоснованной функциональной зависимости и подбора параметров для нее, а в форме набора (часто весьма большого) простых с вычислительной точки зрения дескрипторов. Построенные таким образом потенциалы с помощью алгоритмов машинного обучения параметризуются в основном с использованием результатов первопринципных расчетов, а также наборов имеющихся целевых экспериментальных данных. Использование многопараметрических MLIP потенциалов позволяет с высокой точностью приближать результаты КМД расчетов к первопринципным. Появляется возможность проводить МД расчеты для намного бóльших по размерам систем и для намного бóлее длинных КМД траекторий. При этом в MLIP КМД расчетах доступен весь арсенал вычислительных инструментов, разработанных в рамках классической молекулярной динамики.

В настоящей работе в качестве MLIP модели был использован потенциал в приближении тензорных моментов (Moment Tensor Potential – МТР) [1], так как на примере ряда материалов было показано [2], что данный вид потенциалов имеет лучшее или сопоставимое соотношение быстродействие-точность по сравнению с другими машинно-обученными моделями (GAP, SNAP, QSNAP и др.). Также за счет выбора т. н. уровня МТР потенциала существует возможность контроля баланса точности описания обучающих и тестовых первопринципных данных и вычислительной сложности (временем счета) потенциала.

Оптимизация коэффициентов МТР потенциала для рассматриваемых материалов (уран, плутоний, платина) выполнялась на основе данных первопринципных расчетов. Поскольку различным значениям температуры в рассматриваемых диапазонах (от линий плавления до 60 кК) соответствуют различные вклады электронных подсистем в свободную энергию, то для каждой температуры выполнялось независимое построение классического МТР потенциала. Обучение потенциалов МТР типа с использованием дообучения «на лету» выполнялось нами для заданных температур в диапазоне плотностей от $\sim 0,8$ до $\sim 2,2$ от плотности в нормальных условиях.

Динамическая вязкость жидких металлов при различных условиях определяет число Рейнольдса, играющее важную роль в гидродинамике и характеризующее отношение инерционных сил к силам вязкого трения в жидкостях и газах. Соотношение чисел Рейнольдса контактирующих материалов определяет условия развития неустойчивостей и турбулентности, например, при прохождении ударных волн через границы раздела разноплотных веществ.

Для определения динамической вязкости при различных плотностях и температурах использовались соотношения Кубо-Грина, выражающее коэффициент динамической вязкости 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 КМД траекториях в NVT ансамбле. Расчеты выполнялись для систем размером $N = 4000$. Длительность каждого NVT расчета составляла 2 млн. шагов. Интервал усреднения для оценки автокорреляционной функции составлял 5000 шагов (т. е., 400 статистически независимых траектории в каждой (ρ, T) -точке). Достижение такой статистики непосредственно в первопринципных МД расчетах без использования MLIP подхода в разумные сроки в настоящее время просто невозможно.

В результате КМД расчетов с обученными МТР потенциалами были получены значения динамической вязкости для жидких урана, плутония и платины при различных плотностях и температурах. Выполнено сравнение расчетных значений с доступными экспериментальными данными.

Литература

1. **Shapeev, A. V.** Moment Tensor Potential: A Class of Systematically Improvable Interatomic Potential [Text] // Multiscale Model. Simul. – 2016. – Vol. 14. – P. 1153–1173.
 2. **Zuo, Y.** Performance and cost assessment of machine learning interatomic potentials [Text] / Y. Zuo et al. // J. Phys. Chem. A. – 2020. – Vol. 124. – P. 731.
-