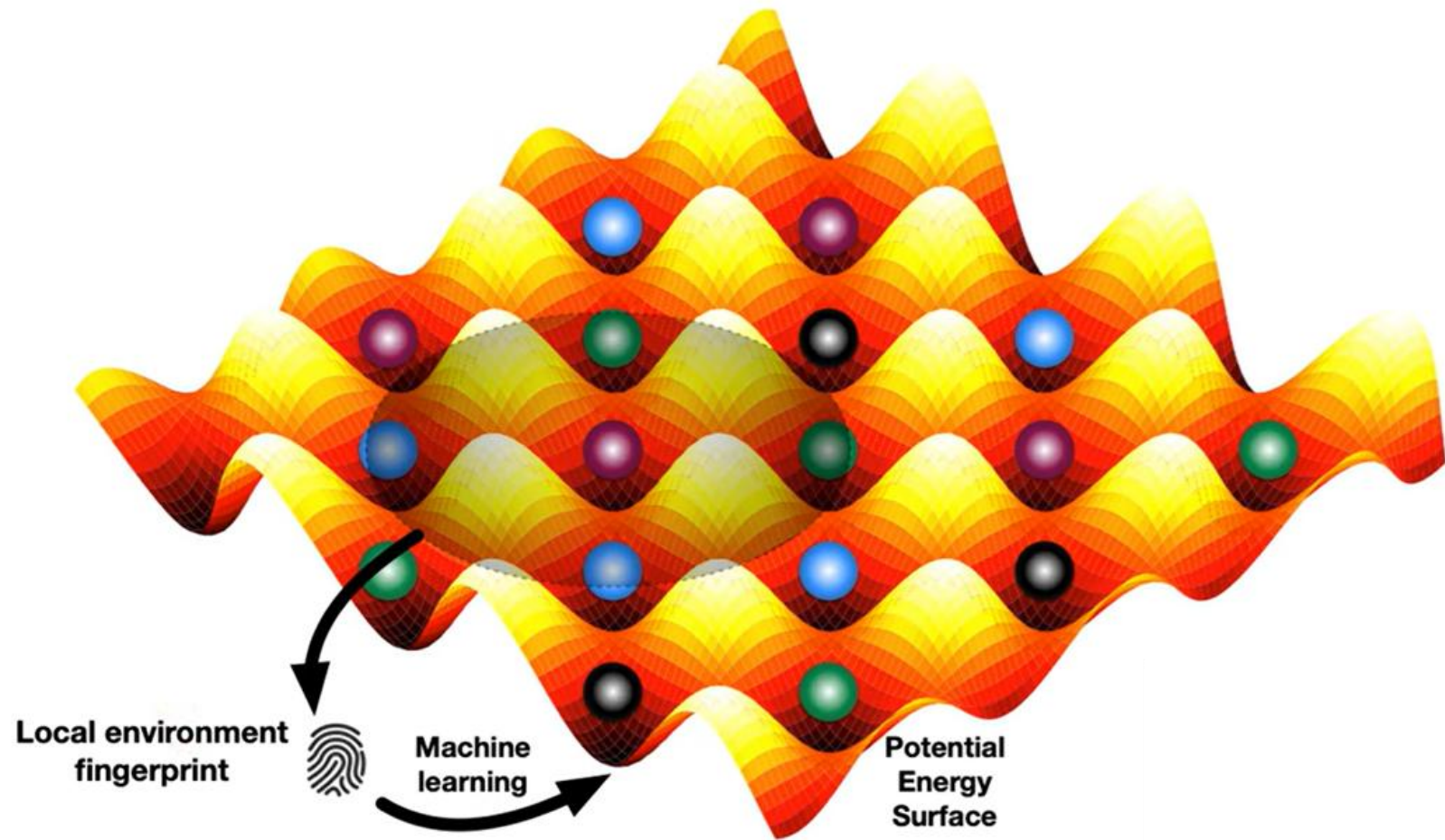


Исследование границ применимости машинно- обучаемых потенциалов

Автор: Карпеев Фёдор Алексеевич

Актуальность работы

- 1) Симуляция с помощью квантовой механики слишком ресурсоемка
- 2) Машинно-обучаемые межатомные потенциалы (МОПы) позволяют достичь высокой скорости и качества
- 3) Переносимость по составу – сможет ли потенциал, обученный на одних концентрациях, предсказывать свойства других?
- 4) Тройная система Al–Cu–Ni.

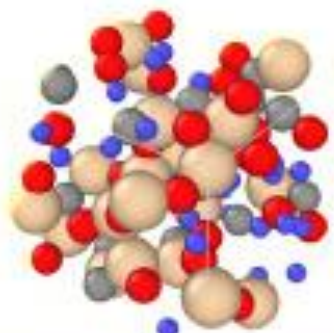


Machine learning model $y = f(x)$

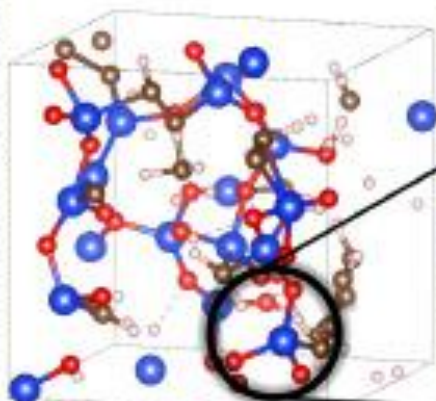
$$E_{\text{atomic}} = f(G)$$

$$F_{\text{atomic}} = f'(G)$$

DFT Calculation



Build database



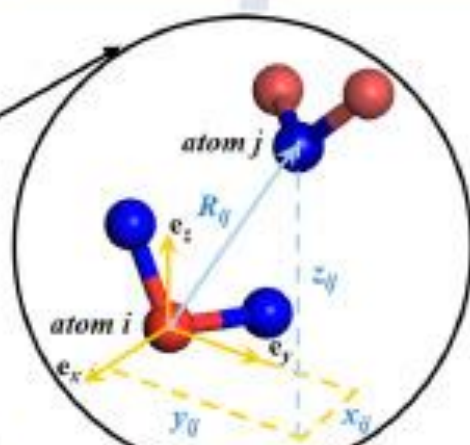
Output layer E_i

Fitting net $\mathcal{N}$

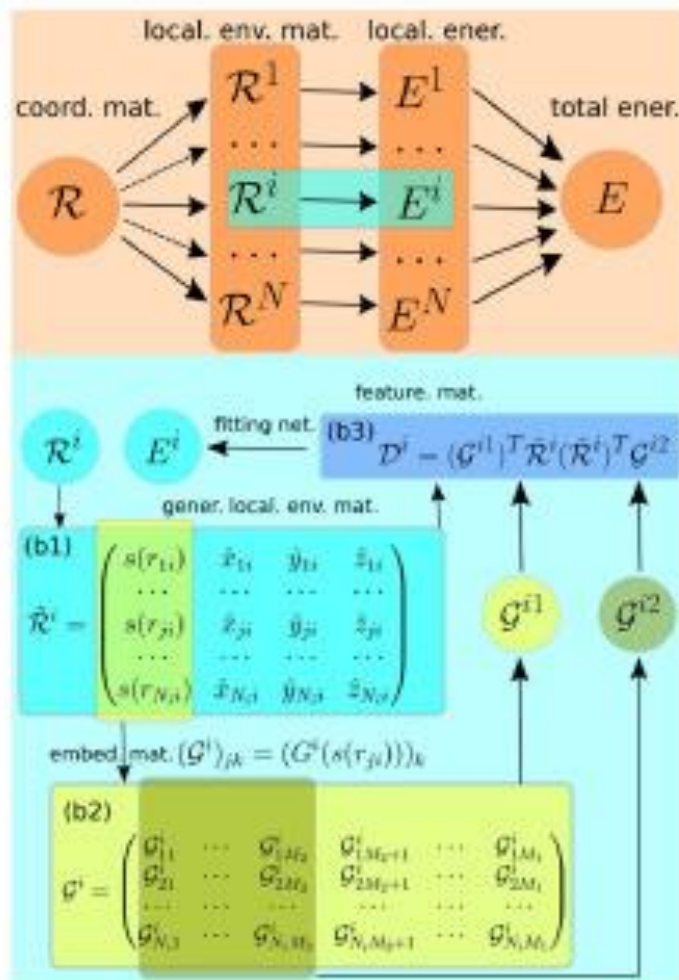
Descriptor $\mathcal{D}$

Embedding net $\mathcal{G}_i$

Local env. matrix $\mathcal{R}_i$



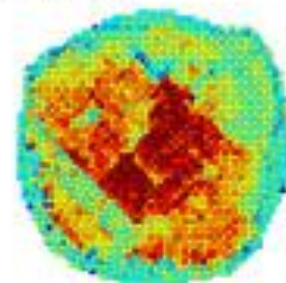
Machine Learning



L. Zhang, et al., *ANIPS*, 2018.

Large scale model

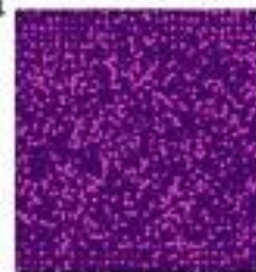
Mechanics



Solidification



Melt



Цель и задачи

Цель: Изучить композиционную переносимость МОП для многокомпонентных расплавов на примере Al–Cu–Ni в рамках увеличение концентрации алюминия.

Гипотеза: потенциалы, обученные на ограниченном наборе составов, сохраняют точность при изменении концентраций.

Задачи:

1. Обучить потенциалы в пакетах MLIP-4 (моментные тензоры) и DeePMD-kit (глубокие нейросети).
2. Провести симуляции в LAMMPS для разных составов.
3. Рассчитать :
 1. RDF (Радиальная функция распределения) гистограмма плотности от расстояния
 2. VACF (функция автокорреляции скорости)
 3. Плотность
4. Сравнить предсказания моделей, обученных на разных объёмах данных.

$$\text{VACF}(t) = \frac{\langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(t) \rangle}{\langle v^2 \rangle}$$

Методика обучения потенциалов

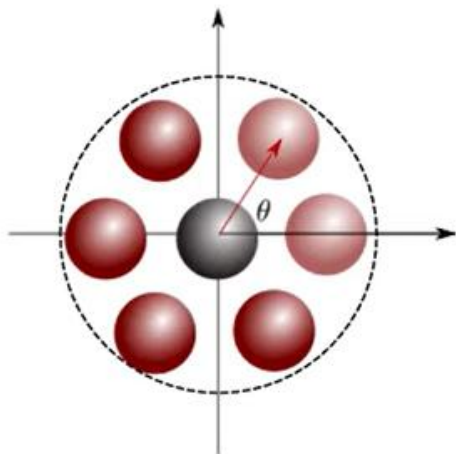
Исходные данные: Получены моделированием с помощью квантовой механики расплавы системы Al-Cu-Ni по 510 атомов из работы Рыльцева и Щелкачева. Были созданы три обучающие выборки: центр (только эквиатомный состав, 5119 конфигураций), центр и углы (чистые металлы и эквиатомный состав, 9573 конфигураций), полные данные (27944 конфигураций).

MLIP-4

Использовался MTP с 935 параметрами и радиусом обрезания 5 Å.

DeePMD-kit

Для DeePMD применялся такой же радиус обрезания 5 Å, количество параметров около 2,6 миллионов.



Методика проведения симуляций

Из 510 атомов с помощью сверхъячейки 2x2x2 делается ~4000 атомов. Мы поочередно проводим эксперименты с составами с возрастающим количеством алюминия. Везде используется шаг 1 фс.

RDF, VACF

Уравновешивание в NVT-ансамбле 10 000 шагов

RDF: 50 000 шагов NVT, запись каждые 20 шагов

VACF: 5 000 шагов NVT, скорости на каждом шаге

Плотность

Уравновешивание в NPT-ансамбле 10 000 шагов

Плотность: 50 000 шагов NPT, запись каждые 100 шагов

Метрики для сравнения

Используем метрики отклонения модели обученной на всех данных от моделей обученных на частичных данных.

$$\left| \frac{X_{\text{full}} - X_{\text{center/corner}}}{X_{\text{full}}} \right|$$

Относительная разница в первом
и втором экстремуме

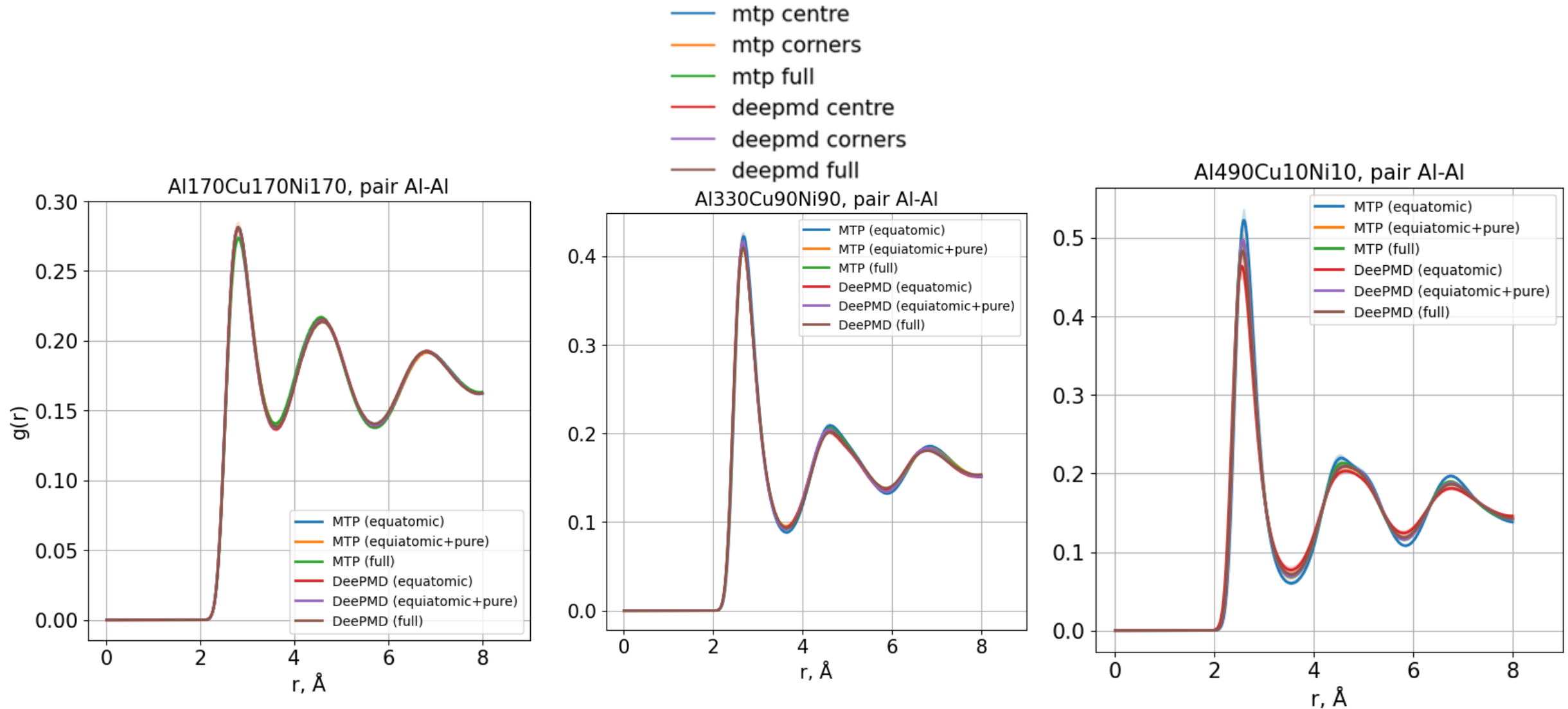
$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f_{\text{full}}(i) - f_{\text{center/corner}}(i))^2}$$

RMSE между графиками

Результаты обучения моделей

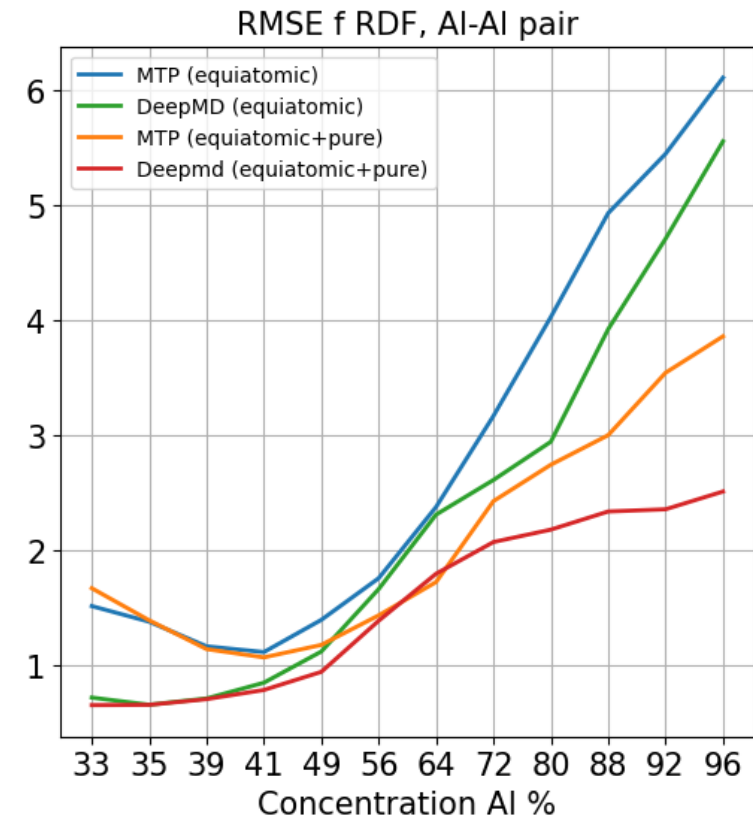
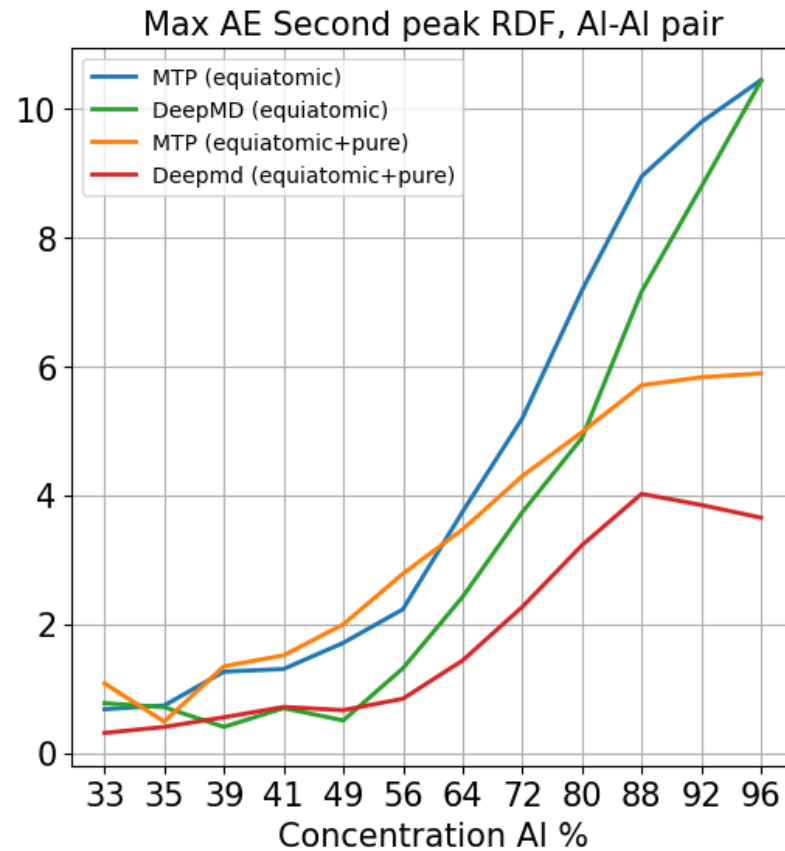
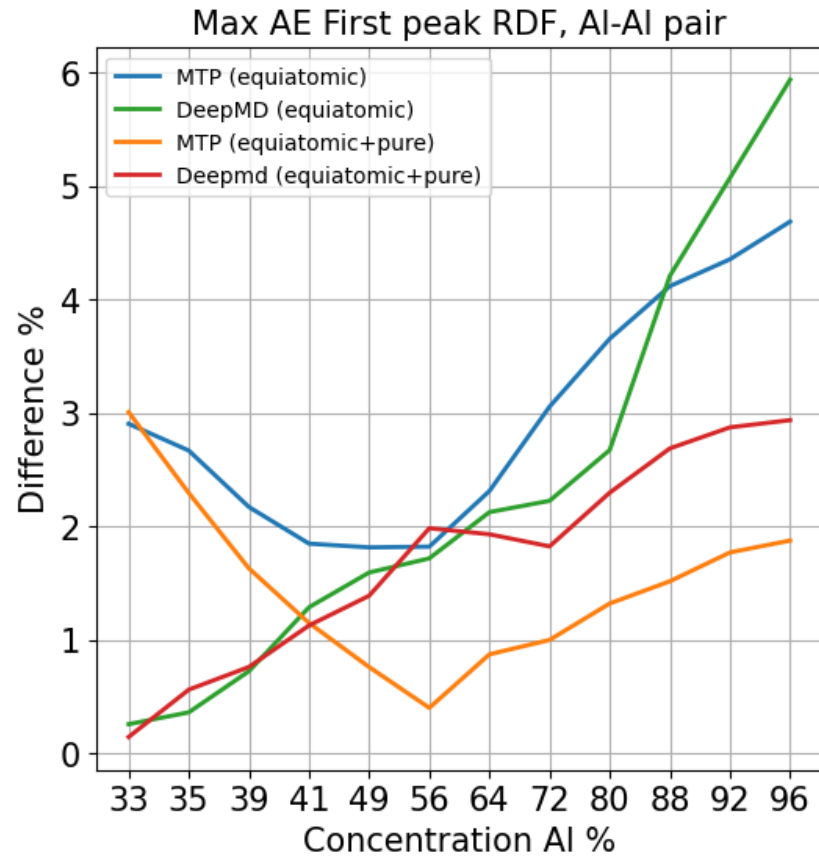
Модель (обучающий набор)	Ошибка энергии, мэВ/атом	Ошибка сил, мэВ/Å (%)	Ошибка вириала, эВ (%)
МТР (эквиватомный)	$1,25 \pm 0,03$	$85 \pm 3,5$ ($12,0 \pm 0,5$)	$5,78 \pm 0,93$ ($23,4 \pm 3,7$)
DeePMD (эквиватомный)	$0,92 \pm 0,01$	$70,8 \pm 0,3$ ($10,0 \pm 0,04$)	$2,52 \pm 0,01$ ($10,2 \pm 0,04$)
МТР (эквиватомный + чистые)	$1,12 \pm 0,06$	$75,4 \pm 3,2$ ($11,5 \pm 0,5$)	$6,51 \pm 2,20$ ($34,8 \pm 11,6$)
DeePMD (эквиватомный + чистые)	$0,9 \pm 0,01$	$64,3 \pm 0,5$ ($9,8 \pm 0,07$)	$3,04 \pm 0,02$ ($16,2 \pm 0,1$)
МТР (полный)	$2,41 \pm 0,19$	$92,4 \pm 2,8$ ($13,1 \pm 0,4$)	$13,82 \pm 2,66$ ($40,0 \pm 7,7$)
DeePMD (полный)	$1,77 \pm 0,08$	$83,8 \pm 0,5$ ($11,9 \pm 0,07$)	$3,86 \pm 0,19$ ($11,1 \pm 0,5$)

Результаты RDF пара Al-Al



Результаты RDF пара Al-Al

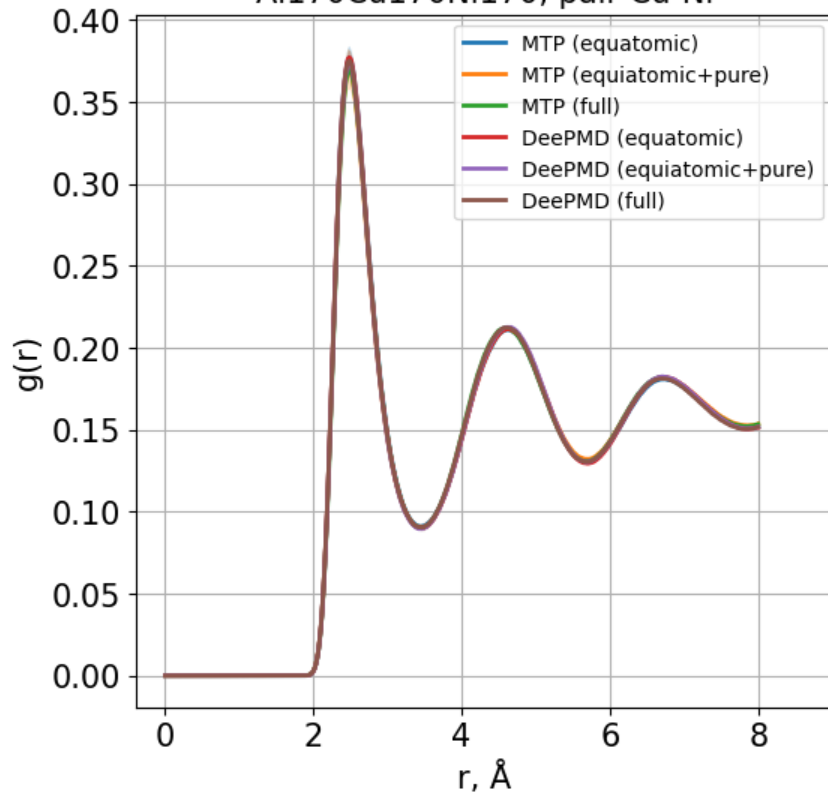
- MTP full/centre
- MTP full/corners
- DeePMD full/centre
- DeepMD full/corners



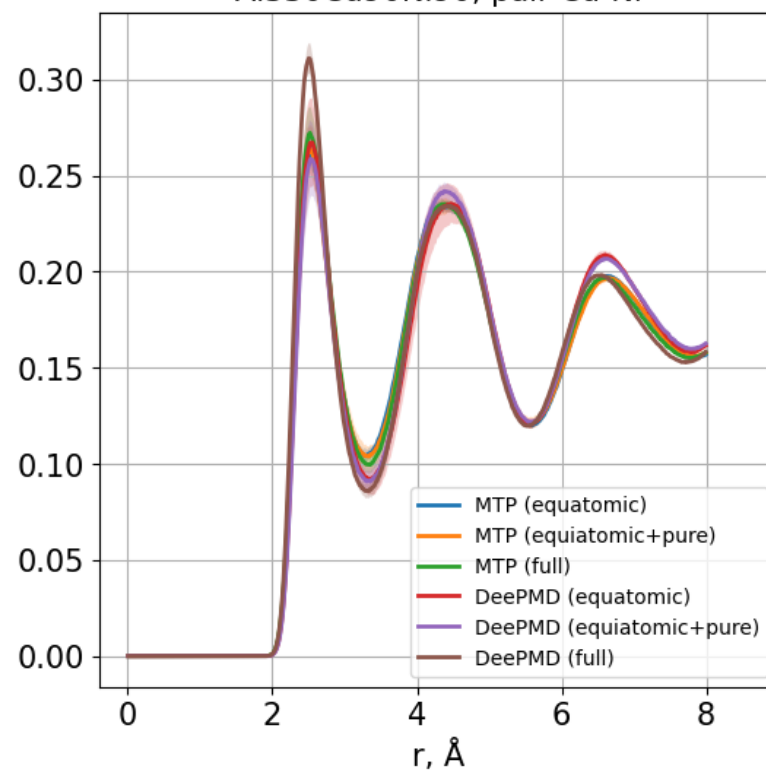
Результаты RDF пара Cu-Ni

- mtp centre
- mtp corners
- mtp full
- deepmd centre
- deepmd corners
- deepmd full

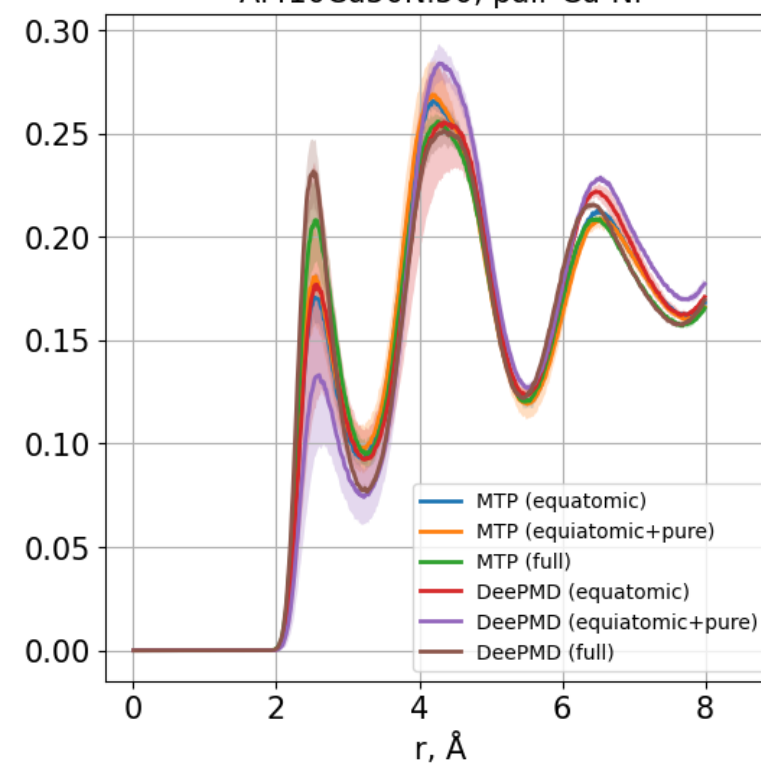
Al170Cu170Ni170, pair Cu-Ni



Al330Cu90Ni90, pair Cu-Ni



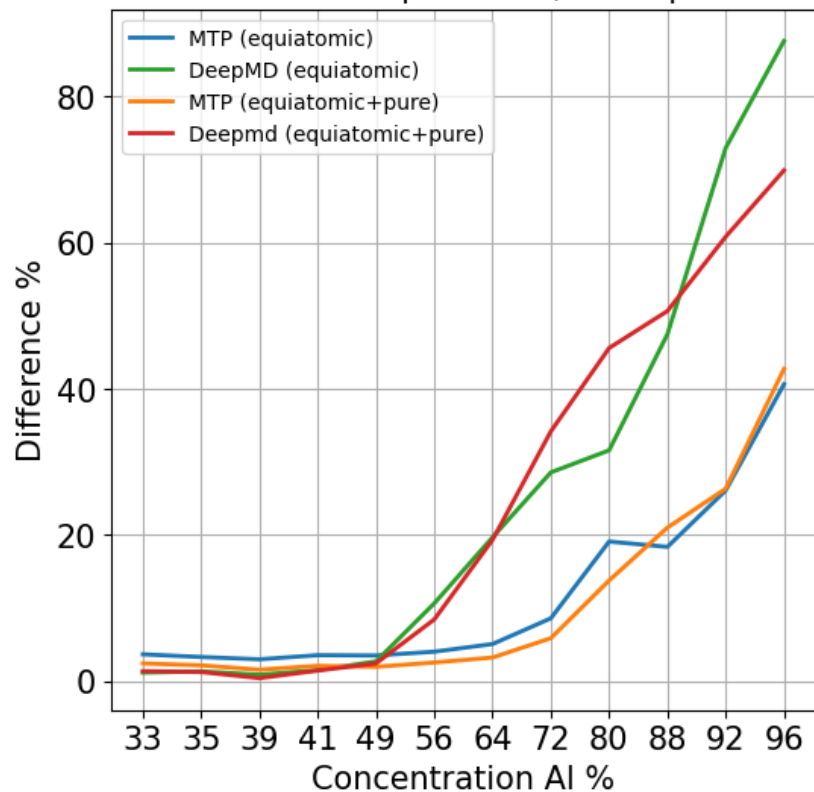
Al410Cu50Ni50, pair Cu-Ni



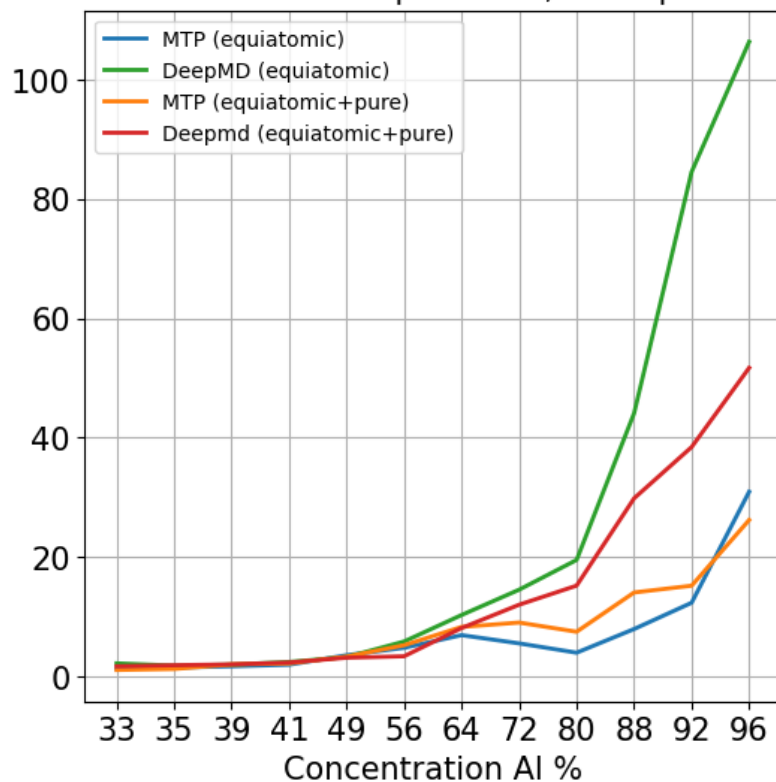
Результаты RDF пара Cu-Ni

- MTP full/centre
- MTP full/corners
- DeePMD full/centre
- DeepMD full/corners

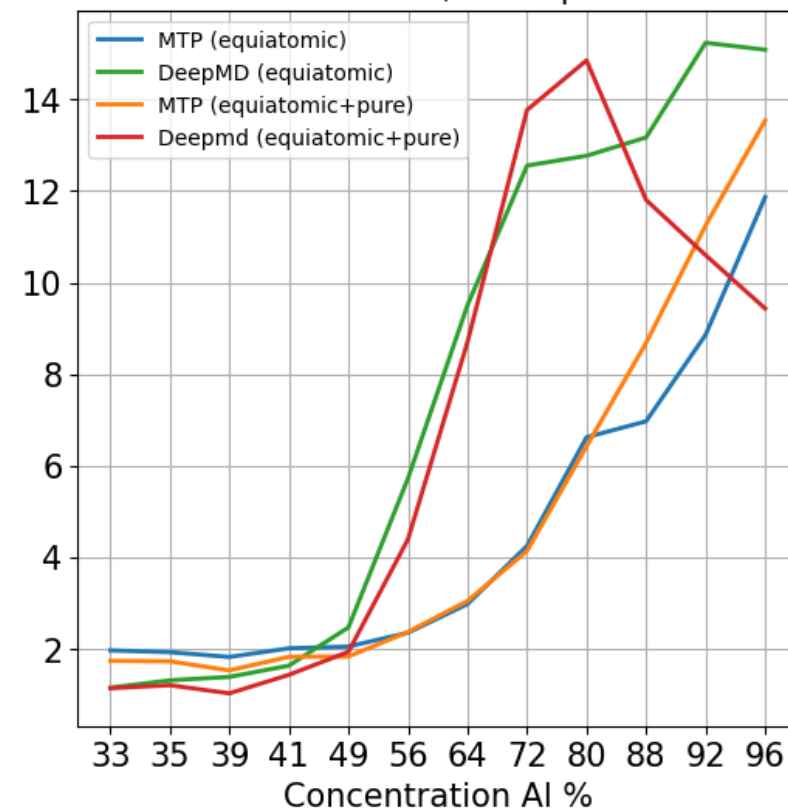
Max AE First peak RDF, Cu-Ni pair



Max AE Second peak RDF, Cu-Ni pair

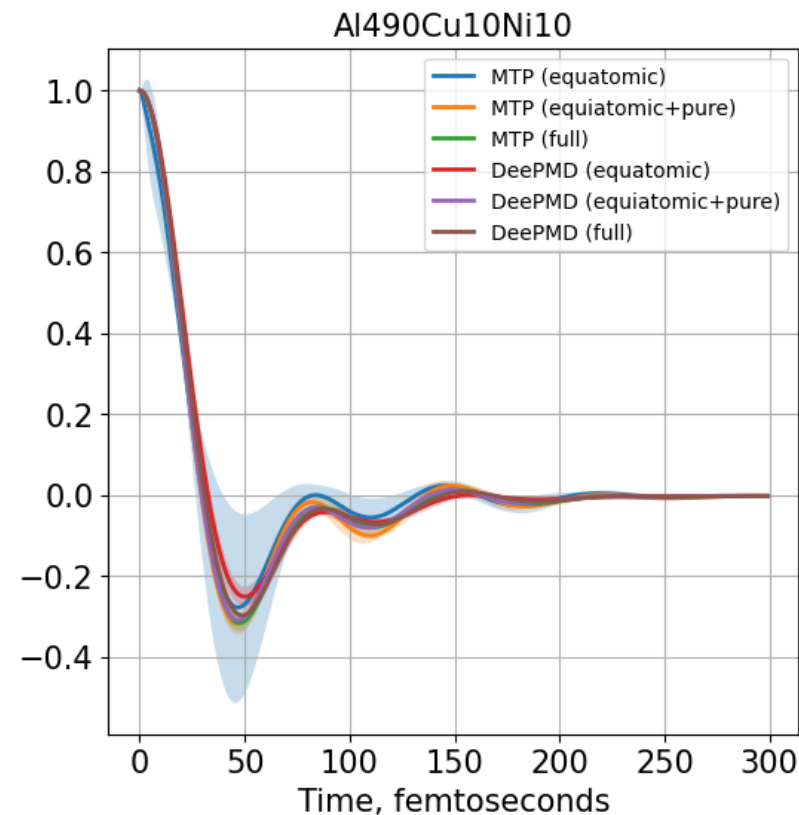
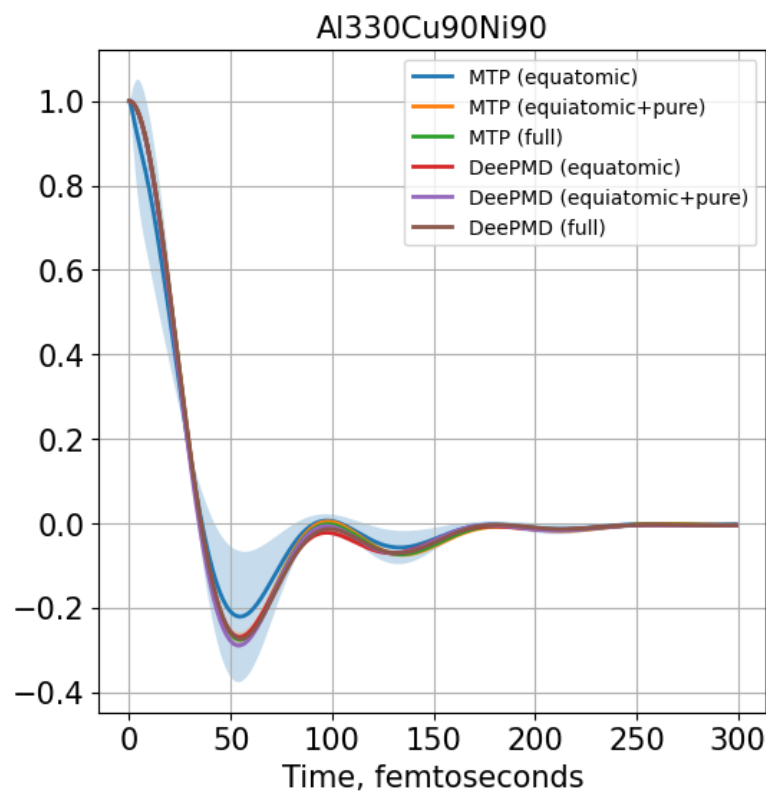
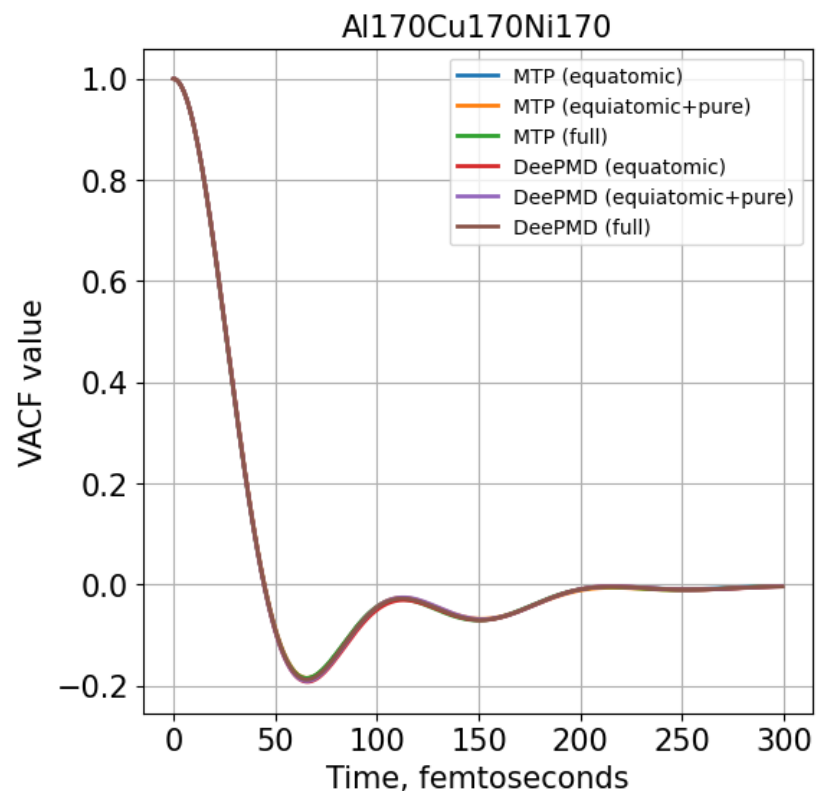


RMSE f RDF, Cu-Ni pair



Результаты VACF

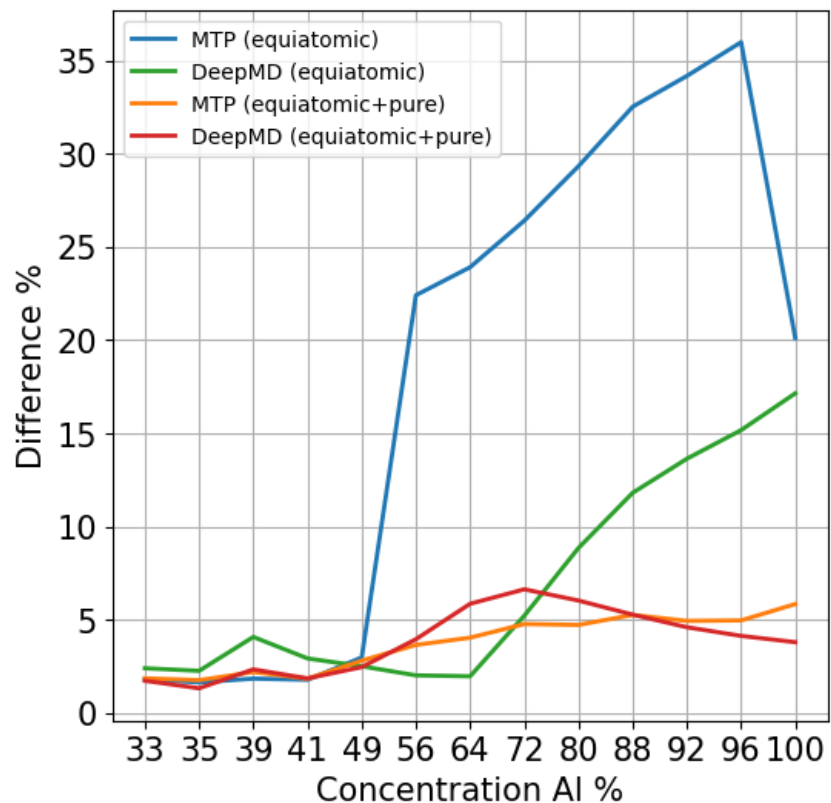
- mtp centre
- mtp corners
- mtp full
- deepmd centre
- deepmd corners
- deepmd full



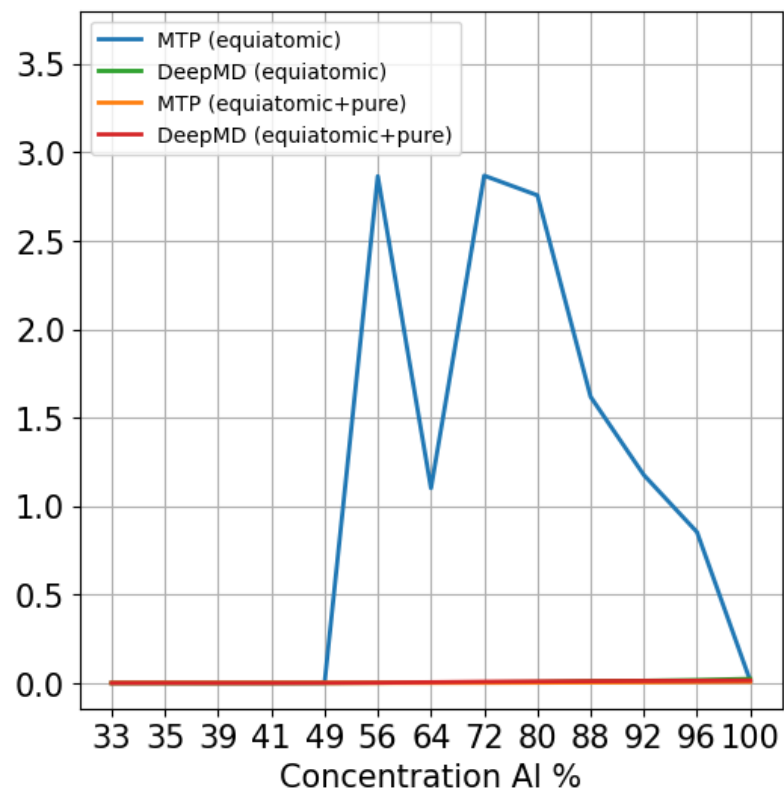
Результаты VACF

- MTP full/centre
- MTP full/corners
- DeePMD full/centre
- DeePMD full/corners

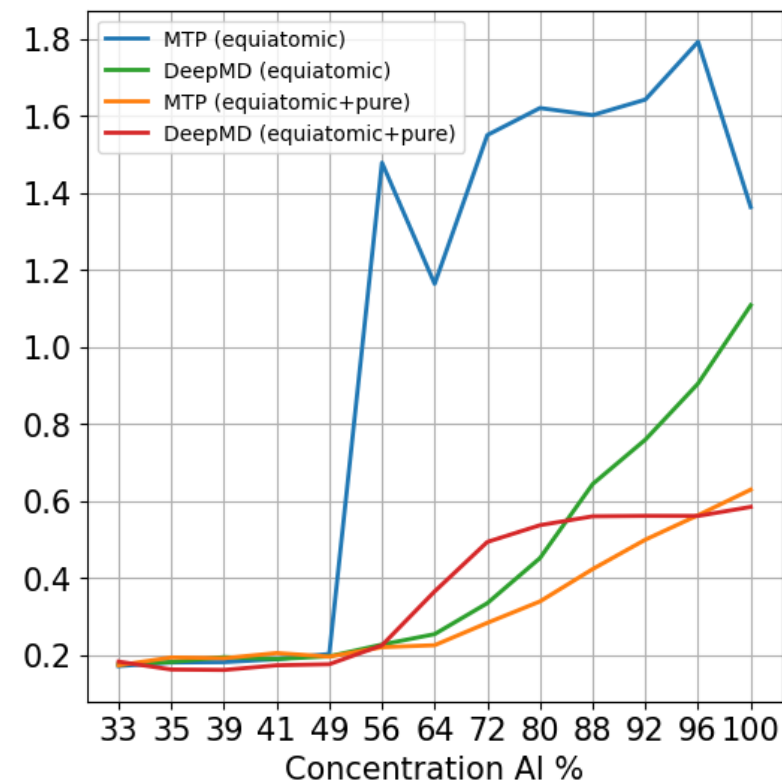
Max AE First Extr VACF



Max AE Second Extr VACF

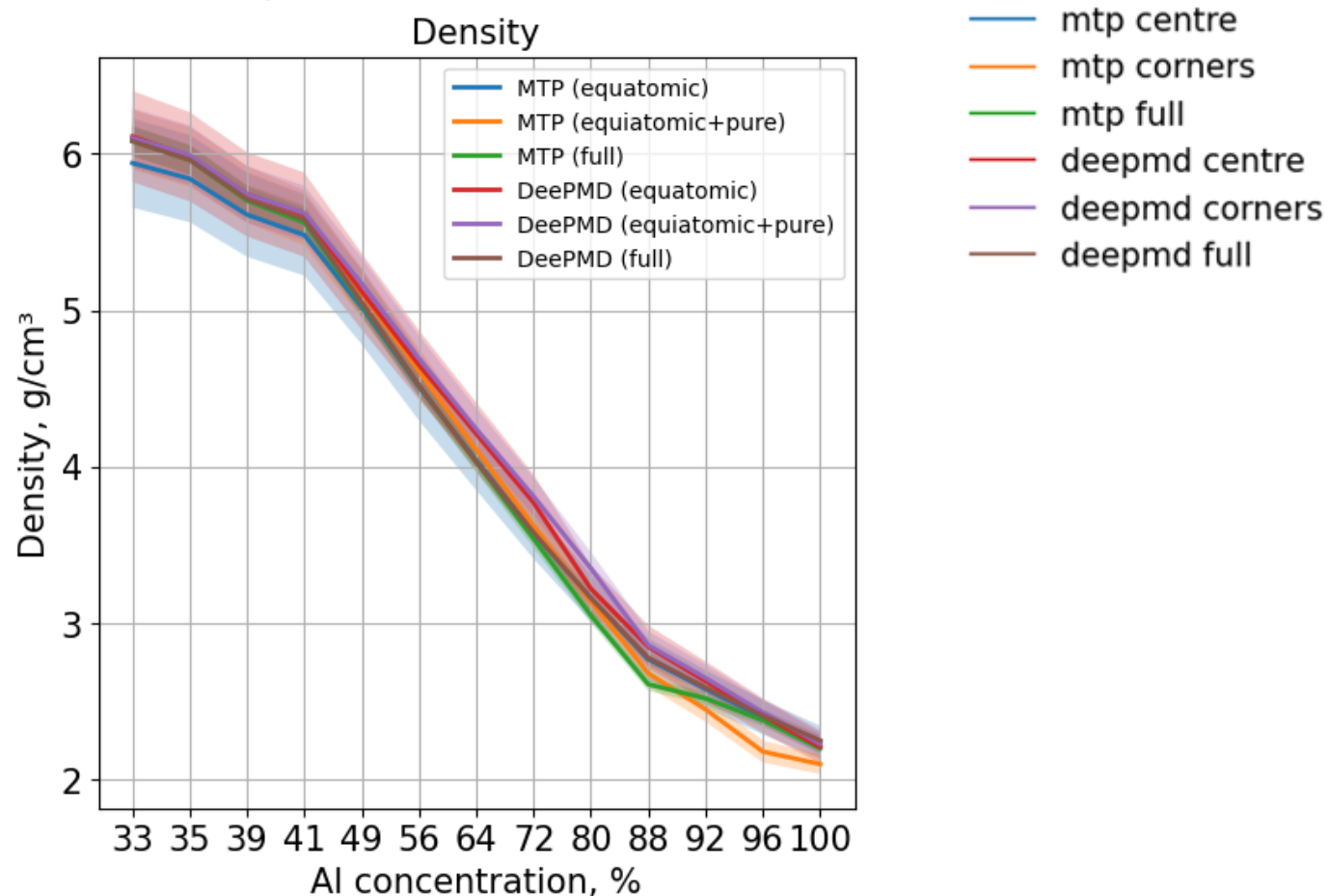


RMSE f RDFF VACF



Результаты плотностей

В расчете плотностей проявились существенные отличия, потенциал МТР нестабильно рассчитывает плотности при высоких концентрациях алюминия, в связи с этим было обучено еще по 4 потенциала МТР.



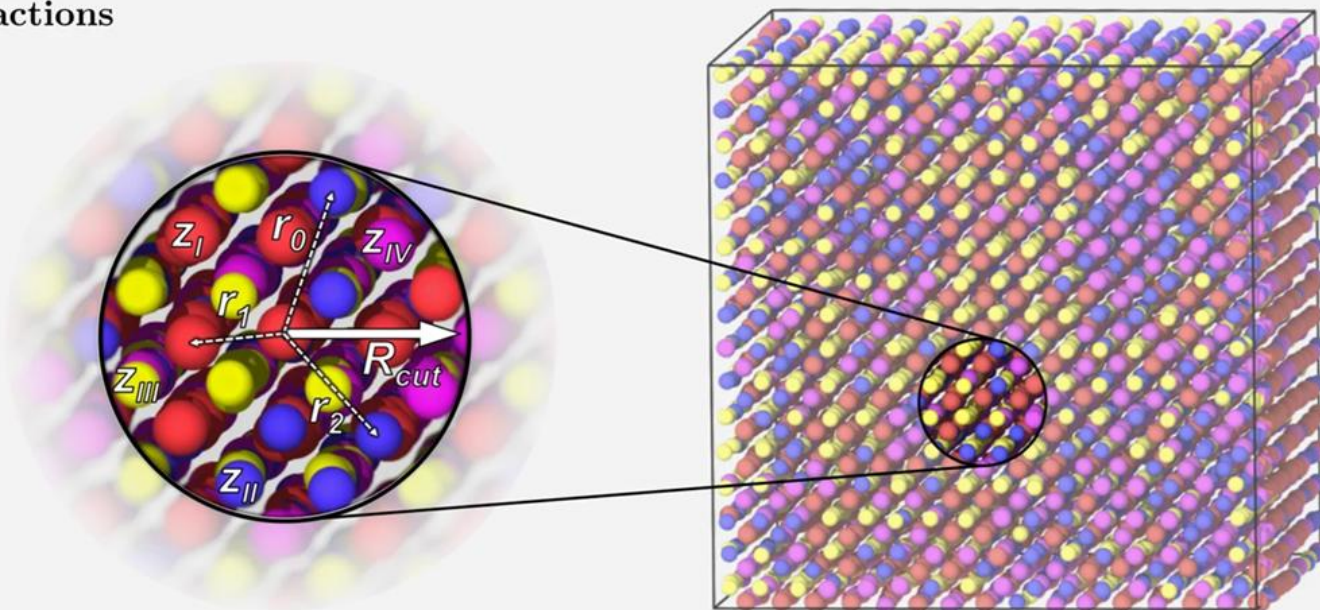
Выводы

- Переносимость по составу подтверждена для обоих пакетов. Потенциалы, обученные на ограниченных концентрациях, предсказывают свойства модифицированных сплавов.
- RDF и VACF оба МОП дают качественное согласие, ошибки не превышают нескольких процентов.
- При высоких концентрациях AI MTP теряет стабильность в NPT, DeePMD остаётся устойчивым.
- DeePMD надёжнее для экстраполяции, MTP проще и быстрее для интерполяции в известной области.
- Практическая значимость: работа даёт количественные критерии, когда можно доверять МОП при дизайне новых сплавов.

ОКН

a) Locality of interatomic interactions

- Atomistic system $\{\mathbf{r}_i, Z_i\}_{i=1}^{N_{\text{at}}}$
- Interactions within R_{cut}
- Environment of an atom $\{\mathbf{r}_i, Z_i, \{\mathbf{r}_j, Z_j\}_{j \in R_{\text{cut}}}\}$
- Environment beyond R_{cut} implicitly fitted-in (mean-field-like approach)



b) Building an equivariant (rotations) representation

Invariant polynomials $x^a y^b z^c$



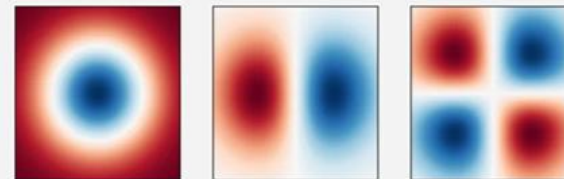
MTP

$$\sum_{j \neq i}^{N_{\text{cut}}} \underbrace{f(r_{ij})}_{\text{radial part}} \underbrace{\mathbf{r}_{ij} \otimes \dots \otimes \mathbf{r}_{ij}}_{\text{angular part}}$$

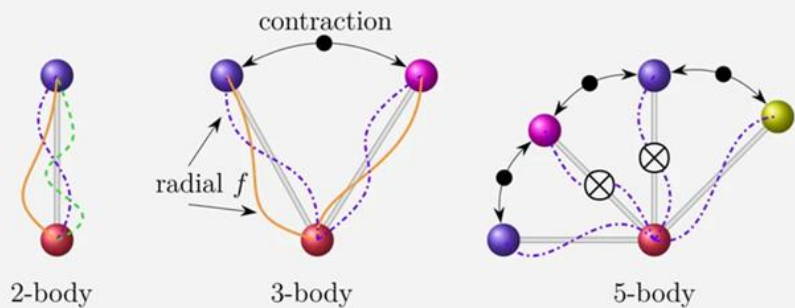
common representation (up to f)

GM-NN

Cartesian GTOs $x^{l_x} y^{l_y} z^{l_z} e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)}$



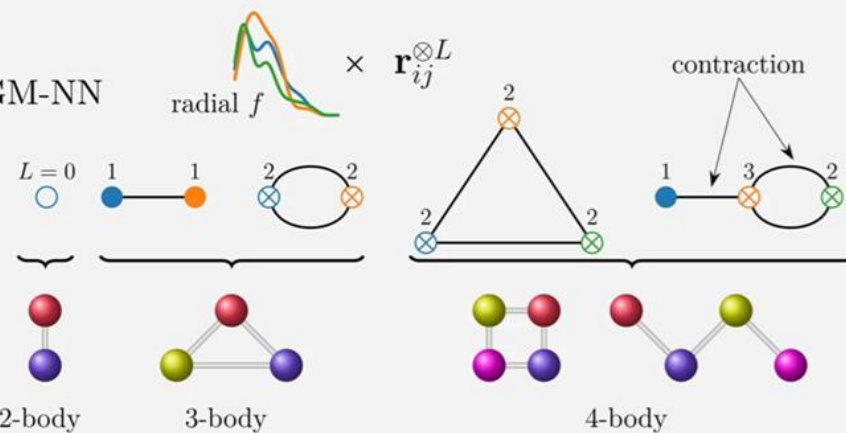
c) Building a rotationally invariant representation



- Select by rule $\text{lev} B_\alpha = (2\mu_1 + \nu_1) + \dots \leq \text{lev}_{\max}$
- Fewer radial functions for higher-body terms

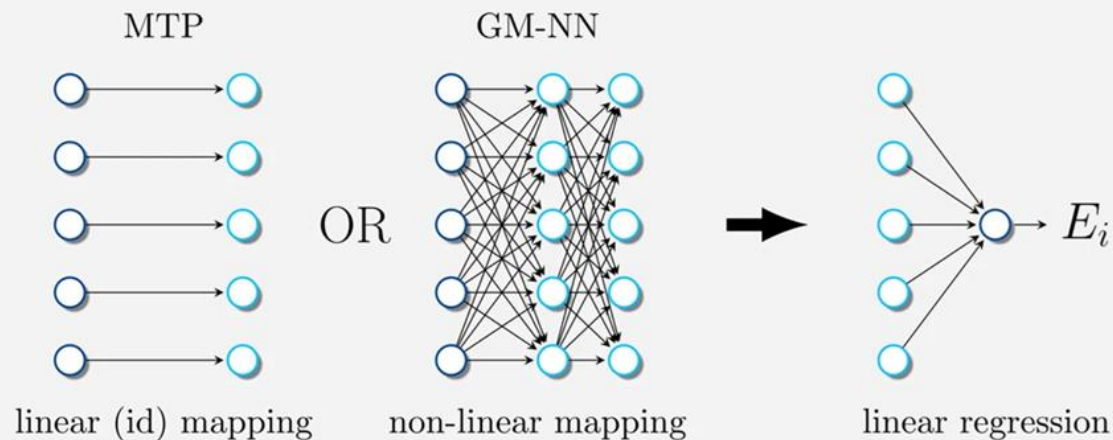
MTP

GM-NN



- Select by symmetries of generating graphs (number of legs)
- Same amount of radial functions for N -body terms

d) Selecting a machine-learning technique



- Total energy $E = \sum_{i=1}^{N_{\text{at}}} E_i$
- Atomic forces $\mathbf{F}_i = -\nabla_{\mathbf{R}_i} E^{\text{tot}}$
- Stress tensor σ (depends on the model)
- Train on ab-initio data $(E^{\text{ref}}, \mathbf{F}^{\text{ref}}, \sigma^{\text{ref}})$
- Minimize combined loss function

$$L(\theta) = \sum_{j=1}^{N_{\text{train}}} C_e \|\Delta E_j\|^2 + C_f \|\Delta \mathbf{F}_j\|^2 + C_s \|\Delta \sigma_j\|^2$$