

ПОТЕНЦИАЛЫ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ СПЛАВОВ: НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ Fe-Cr-C

Хазиева Е.О.^{1,2}, Щелкачев Н.М.³, Рыльцев Р.Е.^{1,2,3}

¹⁾ Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский федеральный университет имени первого президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³⁾ Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия
E-mail: cat.hazieva@yandex.ru

POTENTIALS OF DEEP MACHINE LEARNING FOR ATOMISTIC MODELING OF METALLURGICAL ALLOYS: THE EXAMPLE OF Fe-Cr-C SYSTEM

Hazieva E.O.^{1,2}, Chchelkatchev N.M.³, Ryltsev R.E.^{1,2,3}

¹⁾ Institute of Metallurgy, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg, Russia

²⁾ Ural Federal University named after the First President of Russia B. N. Yeltsin.
Ekaterinburg, Russia

³⁾ L. F. Vereshchagin Institute of High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia

This paper presents the results of MLIP development and verification for the Fe-Cr-C system, which plays a crucial role in metallurgy as a basis for structural stainless steels.

Межчастичные потенциалы машинного обучения (MLIPS – Machine Learning Interatomic Potentials) – это новый класс силовых полей для атомистического моделирования. Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, нейронной сети) используя эталонные значения, полученные с помощью *ab initio* расчетов. Полученный потенциал затем используется в рамках классического атомистического моделирования что позволяет достигнуть *ab initio* точности при меньших на порядки меньших вычислительных затратах [1]. В последние годы было показано, что MLIPs на основе нейронных сетей являются эффективным инструментом для расчета теплофизических свойств металлических сплавов [1-5].

В данной работе представлены результаты разработки и верификации MLIP для системы Fe-Cr-C, которая играет важнейшую роль в металлургии как основа для конструкционных нержавеющей сталей. С фундаментальной точки зрения эта система интересна наличием сложных химических взаимодействий между переходными металлами и углеродом, а также выраженными магнитными свойствами железа.

Для разработки потенциалов глубокого обучения (DP – Deep Potentials) мы используем пакет DeePMD-kit [5], в котором в качестве регрессионной модели

используется многослойные нейронные сети прямого распространения. Тренировка (параметризация) потенциала производилась в рамках идеологии активного обучения (AL – active learning) в пакете DPGEN [5] с помощью набора неупорядоченных конфигураций (расплавов и переохлажденных жидкостей) во всем диапазоне составов. Эталонные значения энергий и сил вычислялись методом функционала электронной плотности с использованием пакета VASP. Полученный потенциал были верифицированы путем сравнения результатов атомистического моделирования, ab initio расчетов и эксперимента для широкого спектра теплофизических и транспортных свойств системы Fe-Cr-C. Мы показываем, что DP очень хорошо воспроизводит ab initio данные для энергий, сил и вириалов, а также функции радиального распределения и функции автокорреляции скорости, извлеченные из AIMD. Так же потенциал демонстрирует хорошую точность расчета наблюдаемых свойств в сравнении с известными экспериментальными данными.

1. Y. Mishin, Acta Mater. 2021, 214, 116980.
2. N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. 2023, 380, 121751.
3. A.O. Tipeev, R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev, S. Ramprakash, E.D. Zanotto, J. Mol. Liq. 2023, 387, 122606.
4. Е.О. Хазиева, Н.М. Щелкачев, А.О. Типеев, Р.Е. Рыльцев, ЖЭТФ 164, 980 (2023)
5. Wen, T., Zhang, L., Wang, H., Weinan, E., Srolovitz, D. J. Deep potentials for materials science. Materials Futures, 1, 022601, (2022).