

Исследование теплопроводности черного фосфорена методом классической молекулярной динамики с использованием обучения сверточной нейронной сети SchNetPack

Завьялов Д.В.¹, Жариков Д.Н.¹, Конченков В.И.^{1,2}, Шеин Д.В.¹

kontchenkov@yandex.ru

¹ ВолгГТУ, Волгоград, Россия

² ВГСПУ, Волгоград, Россия

Моделирование теплопроводности методом классической молекулярной динамики (CMD) особенно актуально для двумерных материалов, когда другие методы измерения теплопроводности применять затруднительно. Развивающийся в последние несколько лет подход к вычислению силовых полей методами глубокого обучения на основе данных ab initio молекулярной динамики (AIMD) призван уточнить результаты моделирования методом CMD.

В [1] показано, что полносвязная нейронная сеть, реализованная в пакете DeepMD [2], адекватно представляет силовое поле кристаллического материала (черного фосфорена), давая при моделировании методом CMD близкие к экспериментальным значения плотности [3], но плохо моделирует поле в аморфном материале - полифениленсульфиде. В [1] сделано предположение, что за счет очень большого числа пространственных конфигураций молекулы полимера размерность входных данных оказывается слишком большой для адекватного анализа этих данных при помощи полносвязной нейронной сети.

В настоящей работе выполняется исследование теплопроводности черного фосфорена при помощи пакета LAMMPS с потенциалом межатомного взаимодействия, вычисленным сверточной нейронной сетью с непрерывной фильтрацией (continuous-filter convolutional network), реализованной в пакете SchNetPack 2.0 [4]. Обучение нейронной сети проводится на наборе данных, содержащем 100000 записей (результаты моделирования методом AIMD Кара-Парринелло элементарной ячейки фосфорена в пакете Quantum ESPRESSO). Для моделирования методом CMD пакет LAMMPS был собран из исходного кода с поддержкой вычислений на GPU. Для вычисления теплопроводности используются команды fix/heat и fix/ehex. Получаемые значения теплопроводности и плотности фосфорена коррелируют с результатами, полученными в [3]. Поскольку SchNetPack основан на пакете PyTorch, в настоящий момент выполняется профилировка этого пакета для оптимизации использования GPU. Подготовленную среду планируется использовать в дальнейшем для моделирования полимерных материалов.

Расчеты выполняются на вычислительном кластере Волгоградского государственного технического университета.

Работа поддержана грантом 23-22-00461 "Исследование тепловых свойств упорядоченных и неупорядоченных низкоразмерных материалов методом молекулярного моделирования с потенциалами, полученными при помощи глубокого машинного обучения" Российского научного фонда (конкурс 2022 года "Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований малыми отдельными научными группами").

Ссылки

1. Д.В. Шеин, Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, ЖТФ (2023), 93(12), 1732-1735
2. <https://github.com/deepmodeling/deepmd-kit>
3. Д.В. Шеин, Д.В. Завьялов, Д.Н. Жариков, Моделирование фосфорена методом классической молекулярной динамики с использованием глубокого обучения // Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2022 : тез. докл. IX Междунар. молодеж. науч. конф. (г. Екатеринбург, 16-20 мая 2022 г.), Екатеринбург, 2022. - С. 330-331.
4. К.Т. Schütt, S.S.P. Hessmann, N.W.A. Gebauer, J. Lederer, M. Gastegger, J. Chem. Phys. (2023) **158**, 144801