

ГЛУБОКОЕ МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, СТРУКТУРНАЯ НАСЛЕДСТВЕННОСТЬ И ДИЗАЙН ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ

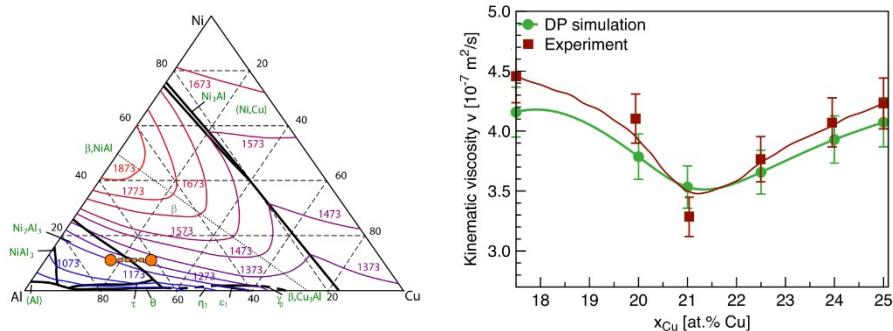
Н.М. Щелкачев¹, Р.Е. Рыльцев²

¹Институт Физики Высоких Давлений РАН, 108840, г.Москва

²Институт металлургии Уро РАН, 620016 г. Екатеринбург

E-mail: chtchelkatchev@hppi.troitsk.ru

Поиск взаимосвязей между элементным составом, структурой и макроскопическими характеристиками материалов является важнейшей задачей как для фундаментальных, так и для прикладных исследований. Большинство современных функциональных материалов на основе металлических сплавов — это многокомпонентные материалы, приобретающие свои физико-химические свойства за счет комплексного легирования большим числом элементов. Большое количество степеней свободы делает чисто экспериментальный процесс поиска оптимальных составов сплавов крайне трудоемким и энергозатратным. Традиционный метод исследования таких систем в значительной степени исчерпал свой ресурс и не отвечает современным требованиям. Поэтому важной задачей является разработка новых подходов к дизайну материалов с использованием передовых открытий, новых установленных физических закономерностей, новейших методик исследования вещества. Один из перспективных методов — многомасштабное моделирование, основанное на применении алгоритмов искусственного интеллекта. Полезная особенность этих подходов — это возможность детально исследовать широкие области термодинамических параметров, что важно для промышленности. Однако недавние исследования показали, что даже этот перспективный подход может быть неточным для расчета транспортных свойств или фазовых диаграмм некоторых металлических сплавов. Стратегия с использованием трансферного обучения и графовых нейросетей позволяет на порядок сократить объем обучающих данных по сравнению со стандартным подходом, и с низкими затратами переобучить межатомный нейросетевой потенциал на нестандартные обменно-корреляционные функционалы, такие, например, как r2SCAN и PBEsol. Например, расчет вязкости в многокомпонентных металлических расплавах представляет собой сложную задачу как для классических, так и для методов *ab initio*. Мы провели моделирование кинематической вязкости в тройных расплавах Al-Cu-Ni с использованием потенциалов глубоких нейронных сетей; отклонение от экспериментальных данных не превышает 12% и близко к интервалу неопределенности экспериментальных данных, см. рис. 1. Что еще более важно, наше моделирование воспроизводит минимальную концентрационную зависимость вязкости эвтектического состава. Таким образом, мы приходим к выводу, что МД-моделирование на основе потенциалов машинного обучения является как перспективным способом расчета вязкости, так и теоретическим способом определения эвтектических



составов.

Рис. 1. Фазовая диаграмма Al-Cu-Ni и кинематическая вязкость.

References

- [1] N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, *Journal of Molecular Liquids* **380**, 121751 (2023).