



Contribution ID: 509

Type: Sectional talk

NNMD: программный пакет для обучения межатомных потенциалов с использованием функций Бехлера-Парринелло

Thursday 10 July 2025 16:45 (15 minutes)

Развитие современных математических сопроцессоров таких, как видеокарты NVIDIA и AMD, привело к широкому внедрению нейронных сетей в научные вычисления. В частности, на основе машинно-обучаемых межатомных потенциалов предложены более эффективные методы молекулярно-динамического моделирования с использованием преимуществ гибридной архитектуры современных суперкомпьютеров.

Данный подход особенно актуален для моделирования и исследования свойств новых композитных материалов. Классические межатомные потенциалы испытывают трудности в решении подобных задач вследствие того, что они не учитывают специфику химических связей между составными частями композита. Для учета таких особенностей удобно использовать нейронную сеть Бехлера-Парринелло на основе одноименных симметричных функций, так как она обучается на данных квантово-химического моделирования.

В данной работе представлен программный пакет, в рамках которого предложен вариант реализации этой нейросети на основе языка программирования Python и фреймворка PyTorch. Все вычисления производятся через тензорные операции фреймворка, поскольку форма функций Бехлера-Парринелло позволяет осуществить векторизацию вычислений. Проект имеет интерфейс для пакета ASE, который делает доступным молекулярно-динамические эксперименты с использованием нейронной сети. Пакет протестирован на ряде классических и квантово-химических моделей таких, как потенциал Леннарда-Джонса и идеальные кристаллы IV металлов. Показано, что использование данного подхода дает релевантные результаты при минимуме затрат на написание и сопровождение программного кода.

Authors: ROMANOV, Alexander (Voronezh State University); Mr BUDNIKOV, Andrey (Voronezh State University)

Presenter: Mr BUDNIKOV, Andrey (Voronezh State University)

Session Classification: Methods and Technologies for Experimental Data Processing