

Отчет о работе PassiveLearningMTP

Часть 1.

Обучение и валидация потенциала на train.cfg и valid.cfg

Обучены 5 потенциалов 12-го уровня на выборке train.cfg. Ошибки валидации получены для каждого из 5 потенциалов по выборке valid.cfg. По результатам обучения и валидации рассчитана неопределенность предсказания ошибок обучения и валидации. Структура init.cfg отрелаксирована с каждым из 5 потенциалов. На основании растяжения-сжатия построены кривые энергия-объем (рис.1).

Таблица 1 — Результаты обучения и валидации на train.cfg и valid.cfg

	train_energy	train_forces	train_stresses_GPa	validation_energy	validation_forces	validation_stresses_GPa
pot_1	0.053905	0.132863	0.312509	0.082945	0.152626	0.318802
pot_2	0.045950	0.125413	0.296478	0.067755	0.143780	0.293934
pot_3	0.045130	0.120427	0.193766	0.071385	0.142432	0.205195
pot_4	0.053753	0.129330	0.319055	0.078179	0.149253	0.325794
pot_5	0.044182	0.121932	0.257222	0.067080	0.141374	0.256311
mean	0.048584	0.125993	0.275806	0.073469	0.145893	0.280007
std	0.004829	0.005151	0.051771	0.006888	0.004834	0.049884

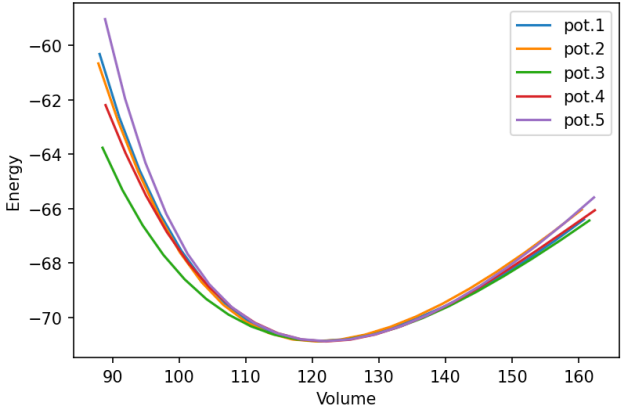


Таблица 2 — Константы упругости для train.cfg

	C11	C12	C44
pot_0	90.448674	18.985956	53.061663
pot_1	95.460013	35.347483	48.312332
pot_2	97.464931	12.279556	43.246797
pot_3	61.212380	-20.909002	42.822392
pot_4	106.316920	35.776019	57.232263
mean	90.180584	16.296002	48.935089
std	17.179524	23.184100	6.244623

Рисунок 1 — Зависимость энергии от объема для потенциалов, обученных на train.cfg

Сравнение с DFT

Сравним результаты DFT (<https://arxiv.org/pdf/1808.03783.pdf>) с полученными ранее значениями констант упругости.

	DFT	MTP (train.cfg)
C ₁₁	91.1	90±17
C ₁₂	5.9	16±23
C ₄₄	53.2	49±6

Полученные результаты для констант упругости сходятся с результатами DFT в пределах ошибки усреднения.

Часть 2.

Обучение потенциала на train_full.cfg

Проведено обучение 5 потенциалов 12-го уровня на выборке train_full.cfg. Дальнейшая обработка совпадает с частью 1. Кривые энергия-объем показаны на рисунке 2.

Таблица 3 — Результаты обучения на train_full.cfg

	train_energy	train_forces	train_stresses_GPa
pot_1	0.051837	0.113029	0.262533
pot_2	0.054394	0.115163	0.253929
pot_3	0.055800	0.121499	0.271099
pot_4	0.058127	0.108072	0.235962
pot_5	0.053804	0.108826	0.311145
mean	0.054793	0.113318	0.266934
std	0.002345	0.005434	0.027927

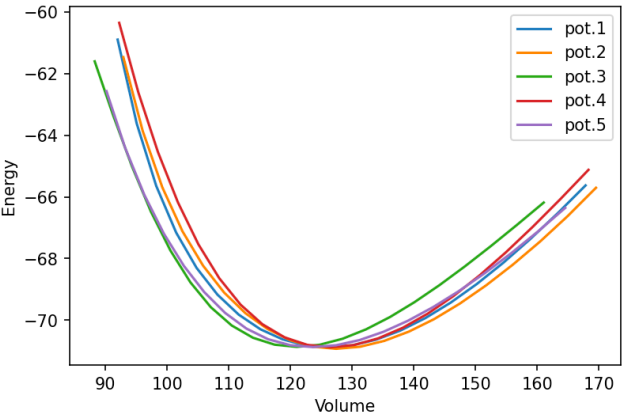


Таблица 4 — Константы упругости для train_full.cfg

	C11	C12	C44
pot_0	141.428419	24.402299	58.240060
pot_1	214.575080	88.875362	76.201528
pot_2	84.539005	9.968035	64.748689
pot_3	215.674591	118.486374	39.876549
pot_4	59.420222	-13.253162	41.470094
mean	143.127463	45.695781	56.107384
std	72.128781	55.605325	15.497462

Рисунок 2 — Зависимость энергии от объема для потенциалов, обученных на train_full.cfg

Сравнение результатов частей 1 и 2

По результатам обучения можно сказать, что при использовании train_full.cfg ошибка обучения становится меньше, причем средние значения отличаются незначительно от значений в части 1. Но здесь нет информации об ошибке валидации. Что касается расчета констант упругости — данный подход дает результат хуже, чем использованный в части 1.

Часть 3

Обучение потенциала более высокого уровня на train_full.cfg

Проведено обучение 5 потенциалов 14-го уровня на выборке train_full.cfg. Дальнейшая обработка совпадает с частью 1. Кривые энергия-объем показаны на рисунке 3.

Таблица 5 — Результаты обучения на train_full.cfg (14 уровень)

	train_energy	train_forces	train_stresses_GPa
pot_1	0.047507	0.096213	0.192356
pot_2	0.058627	0.098106	0.210552
pot_3	0.052565	0.098124	0.186477
pot_4	0.048892	0.095846	0.204421
pot_5	0.049174	0.097748	0.196662
mean	0.051353	0.097207	0.198094
std	0.004471	0.001093	0.009555

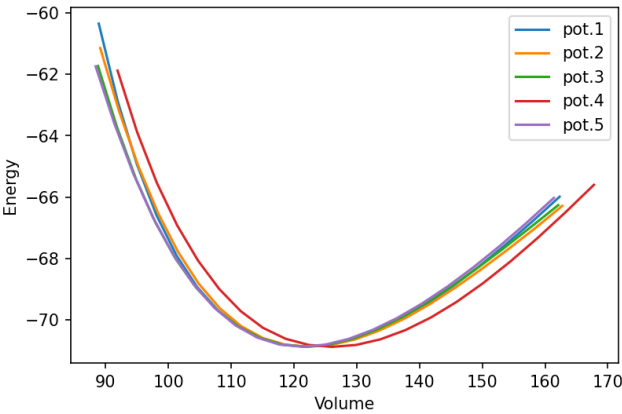


Таблица 6 — Константы упругости для train_full.cfg (14 уровень)

	C11	C12	C44
pot_0	76.713848	0.642834	64.870777
pot_1	71.988011	-4.292851	60.934112
pot_2	87.646009	9.291985	55.287291
pot_3	98.719577	5.909845	34.988949
pot_4	86.312676	10.349159	58.627670
mean	84.276024	4.380194	54.941760
std	10.395946	6.149871	11.686677

Рисунок 3 — Зависимость энергии от объема для потенциалов, обученных на train_full.cfg (14 уровень)

В данном случае константы упругости определяются с большей точностью, чем в случае с train.cfg и 12-ым уровнем.