

Многомасштабное моделирование физических явлений и систем (часть II)

Лекции 10

Применение алгоритмов машинного обучения для
решения задачи параметрической идентификации
потенциалов межатомного взаимодействия

Многомасштабное моделирование кластеров точечных дефектов в полупроводниковых структурах

Описание модели

Для численного моделирования монокристалла кремния использовали элементарную ячейку кремния, состоящую из 8 атомов (рис. 2, а). Далее с помощью параллельных переносов элементарную ячейку размножали до структур кремния, содержащих 616, 1160 и 4504 атома. Моделировали структуру с комплексом точечных дефектов (двух вакансий), расположенных в соседних узлах решетки (рис. 3), с выбранной периодичностью повторяемости дефекта — через ячейку.

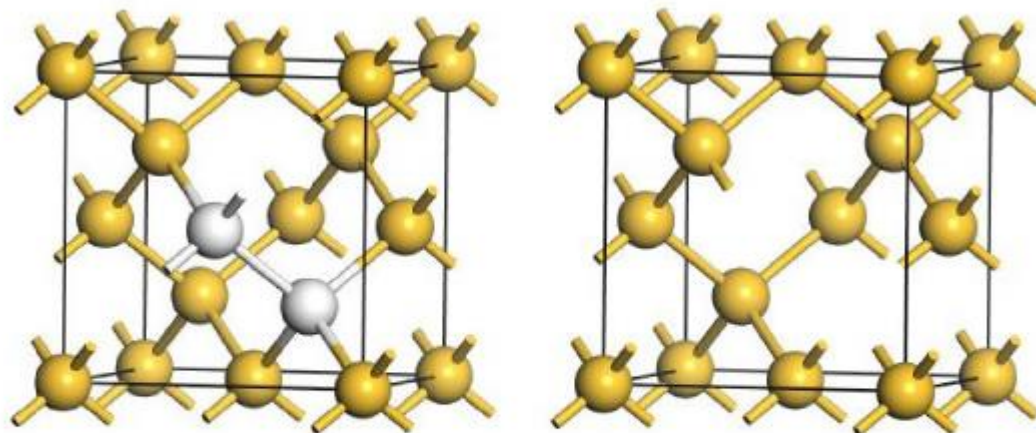


Рис. 2. Кристаллическая решетка Si:
а — без дефектов; б — с дивакансией

Fig. 2. Silicon crystal lattice: (a) without defects, (b) with divacancy

Многомасштабное моделирование кластеров точечных дефектов в полупроводниковых структурах

Решение поставленной задачи

Молекулярно–динамическое моделирование проводили с применением многопараметрического потенциала Терсоффа [6], хорошо зарекомендовавшего себя при решении задач моделирования соединений с ковалентными связями. Расчет когезионной энергии системы атомов осуществляли следующим образом:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij}, \quad (1)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})], \quad (2)$$

$$f_c(r_{ij}) = \left\{ \begin{array}{ll} 1, & r_{ij} < R - R_{cut} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{cut}} \right] \right], & R - R_{cut} < r_{ij} < R + R_{cut} \\ 0, & r_{ij} > R + R_{cut} \end{array} \right\} \quad (3)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp[-\kappa_{ij}(r_{ij} - R_e)], \quad (4)$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp[-\mu_{ij}(r_{ij} - R_e)], \quad (5)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left(1 + \gamma_i^{ni} \zeta_{ij}^{ni} \right)^{\frac{ni}{2}}. \quad (6)$$

где E — полная энергия системы, эВ; V_{ij} — потенциальная энергия взаимодействия двух частиц i и j , эВ; $f_c(r_{ij})$ — функция отсечения (*cutoff*-функция); r_{ij} — расстояние между двумя частицами i и j , Å; R_{cut} — расстояние отсечения, Å; f_R — потенциал отталкивания между двумя атомами, эВ; b_{ij} — параметр притяжения между двумя атомами, эВ; f_A — потенциал притяжения между двумя атомами, эВ; κ_{ij} , R_e , μ_{ij} — параметры потенциала Теософфта, эВ; A_{ij} , χ_{ij} , γ_{ij} — безразмерный параметр потенциала Теософфта.

Параметры потенциала подбирали в результате решения задачи оптимизации [7]:

$$F(\xi) = \omega_1 [E_{coh}(\xi) - E_{coh}^{fpc}]^2 + \omega_2 [a(\xi) - a^{fpc}]^2 + \\ + \omega_3 [B(\xi) - B^{fpc}]^2 + \omega_4 [C'(\xi) - C'^{fpc}]^2 + \\ + \omega_5 [C_{44}(\xi) - C_{44}^{fpc}]^2 + \omega_6 [\zeta(\xi) - \zeta^{fpc}]^2 \rightarrow \min, \quad (7)$$

где $\xi = (\xi_1 \dots \xi_m)$ — параметры потенциала Терсоффа; F — сила, действующая на молекулу, Н; $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_6)$ — весовые коэффициенты; a — постоянная решетка, Å; B — объемный модуль упругости, МБар; C' — модуль сдвига, МБар; C_{44} — постоянная упругости, МБар; ξ — постоянная Клейнмана, (безразмерный); E_{coh}^{fpc} , a^{fpc} , B^{fpc} , C'^{fpc} , C_{44}^{fpc} , ζ^{fpc} — эталонные значения, полученные с помощью первопринципных расчетов и из публикации [8]. Подобранные значения параметров потенциала Терсоффа для структуры кремния приведены ниже.

D_e	2,3631
S	1,4864
β	1,4637
R_e	2,3436
c	113074,1153
d	14,2474
n	0,9388
h	-0,4239
γ	$1,2466 \cdot 10^{-6}$
γ	0,2993

Многомасштабное моделирование кластеров точечных дефектов в полупроводниковых структурах

Молекулярно–динамическое моделирование представляло собой решение задачи Коши для уравнения движения, описанного ниже. В качестве начальных условий такой задачи задавали координаты и скорости каждой из частиц.

$$\left\{ \begin{array}{l} m_n \frac{du_n}{dt} = F_n(x_1, \dots, x_N); \\ m_n \frac{dq_n}{dt} = F_n(y_1, \dots, y_N); \\ m_n \frac{dw_n}{dt} = F_n(z_1, \dots, z_N); \\ \frac{dx_n}{dt} = u_n; \\ \frac{dy_n}{dt} = q_n; \\ \frac{dz_n}{dt} = w_n, \end{array} \right. \quad (8)$$

где $n \in [1, N]$; m_n — масса n -ого атома, $n \in [1, N]$; F_n — сила, действующая на частицу с номером n ; x_n, y_n, z_n — координаты n -го атома, Å; u_n, q_n, w_n — скорость n -го атома, м/с; t — время, с.

Многомасштабное моделирование кластеров точечных дефектов в полупроводниковых структурах

Для интегрирования поставленной задачи Коши был выбран метод скоростей Верле [9]:

$$\begin{aligned} r_n^{k+1} &= r_n^k + \tau_k v_n^k - \frac{\tau_k^2}{2} \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k}, \\ v_n^{k+1} &= v_n^k + \frac{\tau_k}{2} \left(\frac{\partial U_n^{k+1}}{\partial r_n^{k+1}} + \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

где r — координаты атомов, Å; v — скорости атомов, м/с; U — потенциал взаимодействия между двумя атомами, Дж.

Данный метод является компромиссом между точностью и скоростью реализации. Метод является стабильным и точным, а также самостартующим за счет того, что для получения следующего местоположения частицы учитывается ее скорость.

Было проведено исследование на следующих структурах, имеющих кубические решетки: Si, Ge, C, Al, W, Cu, Fe. Для каждой рассматриваемой структуры атомов были известны координаты ее атомов $A(x_1; y_1; z_1)$ и $B(x_2; y_2; z_2)$, значение постоянной решетки (a), а также значение энергии взаимодействия пар атомов (E). Исходные значения энергии взаимодействия были получены с помощью расчетов, проводимых с использованием потенциалов Терсоффа и Морзе. Параметры для потенциалов Терсоффа и Морзе, участвующие в расчете энергии взаимодействия пар атомов, были получены благодаря разработанному программному комплексу подбора параметров потенциалов межатомного взаимодействия [2].

Для использования методов машинного обучения данные были модифицированы следующим образом:

- все категориальные признаки были переведены в числовые;
- с помощью однострочного кодирования был зафиксирован тип взаимодействующих атомов;
- по координатам взаимодействующих атомов было рассчитано расстояние между взаимодействующими атомами;

Был сформирован набор, состоящий из около 40 000 пар взаимодействующих атомов (табл. 1).

Таблица 1

x_1	y_1	z_1	x_2	y_2	z_2	r	E	a	Si	Ge	C	Al	Cu	W	Fe
0,0000	2,7154	2,7154	-1,3577	4,0730	1,3577	2,3516	-2,3150	5,4307	1	0	0	0	0	0	0
2,8300	2,8300	5,6600	4,2450	4,2450	7,0750	2,4509	-1,9251	5,6600	0	1	0	0	0	0	0
1,6282	0,0000	1,6282	0,0500	0,0500	0,0500	2,2324	-1,0361	3,2563	0	0	0	0	0	1	0
0,0000	2,9098	0,0000	0,0200	-0,0200	-0,0200	2,9299	-0,3982	2,9098	0	0	0	0	0	0	1
0,0000	1,7820	1,7820	0,8910	0,8910	0,8910	1,5433	-3,6850	3,5640	0	0	1	0	0	0	0
2,0224	2,0224	0,0000	-0,0350	0,0000	0,0000	2,8849	-1,1742	4,0447	0	0	0	1	0	0	0
3,6204	3,6204	3,6204	0,0000	0,0000	-0,0200	6,2822	-6,3141	3,6204	0	0	0	0	1	0	0

Матрица объектов-признаков состояла из следующих значений: координаты взаимодействующих атомов $(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$, расстояние между атомами (r) , постоянная решетки структуры (a) , указание на взаимодействующие атомы (Si, Ge, C, Al, Cu, W, Fe). Вектор правильных ответов состоял из значений энергий взаимодействия атомов (E) . Чтобы признаки имели примерно одинаковую дисперсию, данные были нормированы.

Так как обученный алгоритм может сильно меняться в зависимости от обучающей выборки, использовалась кросс-валидация – разбиение данных на несколько одинаковых частей для поочередного использования каждой части в качестве тестовой выборки, а оставшейся части – в качестве обучающей выборки. В качестве обучающей модели была построена модель стекинга, особенностью которой является использование различных алгоритмов в качестве признаков объектов. В качестве метаалгоритма, принимающего на вход признаковые значения первичных моделей, было выбрано решающее дерево. В качестве первичных моделей были выбраны: логистическая регрессия, случайный лес и алгоритм ближайших соседей.

В процессе формирования модели был определен оптимальный параметр числа соседей `n_neighbors` для алгоритма ближайших соседей. Также был подобран минимальный параметр `n_estimators` для случайного леса, после которого качество обучения не менялось значительным образом. Для оценки качества работы алгоритма использовались метрики средней квадратичной ошибки и средней абсолютной ошибки.

Моделирование динамики кристаллической решетки с использованием машинного обучения для межатомных потенциалов.

В.В. Ладыгин, П.Ю. Коротаев, А.В. Янилкин, А.В.Шапеев.

В данной работе был применён подход машинного обучения для получения межатомных потенциалов с целью расчета свойств динамики кристаллической решётки с точностью близкой к теории функционала плотности (ТФП). Эффективность подхода в вычислении потенциала позволяет получить доступ к большим масштабам по времени и размерности посредством моделирования молекулярной динамики. Использование активного обучения и автоматической процедуры обучения значительно сокращает количество квантово-механических расчётов над обучающей выборкой. Для оценки точности полученных материалов были исследованы материалы Al, Mo, Ti, U с различными фононными и термодинамическими свойствами. Свойства фононов рассчитывались с использованием метода эффективного потенциала, зависящего от температуры. Как показывает расчёт силовых констант третьего порядка, потенциал воспроизводит не только гармоническое поведение, но и ангармонические эффекты. Мы обнаружили, что потенциалы, полученные методом машинного обучения, воспроизводят квантово-механические данные с высокой точностью. Кроме того, колебательная плотность состояния была получена интегрированием автокорреляционной функции скорости, что было бы невозможным при прямом квантово-механическом моделировании.