

A fast implementation of deep neural-network potentials for molecular dynamics simulations of binary alloy

by

Sandip Kumar Sah

Master Thesis in Computational Science

Submission: October 20, 2025

Supervisor: Prof. Dr. Felix Höfling

Freie Universität Berlin | Department of Mathematics and Computer Science Institute of
Mathematics

Statutory Declaration

Family Name, Given/First Name	Sah, Sandip Kumar
Matriculation number	5589263
Kind of thesis submitted	Master Thesis

English: Declaration of Authorship

I hereby declare that the thesis submitted was created and written solely by myself without any external support. Any sources, direct or indirect, are marked as such. I am aware of the fact that the contents of the thesis in digital form may be revised with regard to usage of unauthorized aid as well as whether the whole or parts of it may be identified as plagiarism. I do agree my work to be entered into a database for it to be compared with existing sources, where it will remain in order to enable further comparisons with future theses. This does not grant any rights of reproduction and usage, however.

This document was neither presented to any other examination board nor has it been published.

German: Erklärung der Autorenschaft (Urheberschaft)

Ich erkläre hiermit, dass die vorliegende Arbeit ohne fremde Hilfe ausschließlich von mir erstellt und geschrieben worden ist. Jedwede verwendeten Quellen, direkter oder indirekter Art, sind als solche kenntlich gemacht worden. Mir ist die Tatsache bewusst, dass der Inhalt der Thesis in digitaler Form geprüft werden kann im Hinblick darauf, ob es sich ganz oder in Teilen um ein Plagiat handelt. Ich bin damit einverstanden, dass meine Arbeit in einer Datenbank eingegeben werden kann, um mit bereits bestehenden Quellen verglichen zu werden und dort auch verbleibt, um mit zukünftigen Arbeiten verglichen werden zu können. Dies berechtigt jedoch nicht zur Verwendung oder Vervielfältigung.

Diese Arbeit wurde noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt noch wurde sie bisher veröffentlicht.

.....
Date, Signature

Abstract

Contents

1	Context	1
1.1	HALMD	1
1.2	DeepMD (version 2)	1
2	Methodology	1
2.1	Parameter Extraction	1
2.2	Coordinate System extension	1
2.3	R Matrix	1
2.4	G Matrix	1
2.5	Descriptor	1
2.6	Potential Calculation	1
2.7	Force Computation	1
2.7.1	descriptor derivative	1
2.7.2	net derivative	1
3	Results	1
4	Evaluation	1
5	Conclusions	1

1 Context

1.1 HALMD

1.2 DeepMD (version 2)

2 Methodology

2.1 Parameter Extraction

2.2 Coordinate System extension

2.3 R Matrix

2.4 G Matrix

2.5 Descriptor

2.6 Potential Calculation

2.7 Force Computation

2.7.1 descriptor derivative

2.7.2 net derivative

3 Results

4 Evaluation

5 Conclusions

References

- [1] Daniel Loebenberg and R Wielputz. "Evolution! from creeper to storm". In: *Presentation for the Seminar on" Malware*. 2006, pp. 1–7.