高精度钛铝铌机器学习势的开发及应用

近日，南京航空航天大学国际前沿科学研究院团队在国际知名的物理学期刊《Physical Review B》上发表了题为“General-purpose neural network potential for Ti-Al-Nb alloys towards large-scale molecular dynamics with *ab* *initio* accuracy”的研究论文。该工作的第一作者为赵志强博士，通讯作者为郭万林院士和张助华教授，共同作者还包括易敏教授。该工作得到了来自国家自然科学基金委、江苏省科技厅等机构项目的资助，以及南京航空航天大学高性能计算中心等部门的支持。

**研究背景**

高Nb含量的TiAl合金具有优异的高温强度和室温延展性，被广泛应用于汽车和航空发动机的热端部件。然而，由于缺乏精确的原子间相互作用势能模型，限制了对高Nb-TiAl合金失效机制的深入理解以及进一步的性能优化设计。

**本文要点**

在本研究中，团队成员基于神经演化势训练框架(NEP)，从第一性原理训练集出发，结合主动学习策略，为轻质Ti-Al-Nb合金体系开发了全新的机器学习势能模型, 称之为NEP-TiAlNb。NEP-TiAlNb模型兼顾第一性原理的精度与传统的嵌入式原子势的速度，并且在低温晶格振动、弹性常数、热膨胀、熔点、广义层错能、界面能以及形成能等性质方面与实验和第一性原理数据高度吻合。在GPUMD软件中，使用4张RTX游戏级显卡可以轻松实现千万级原子规模的大尺度动力学模拟。

基于开发的NEP模型，作者研究了不同浓度Nb掺杂对片层双相TiAl单晶室温以及高温力学性能的影响，在原子尺度复现了高Nb掺杂对TiAl单晶高温强度与延展性的协同提高。该研究成果为理解钛铝基合金的高温失效、发展强韧化方法提供了新的途径。

图1 NEP-TiAlNb模型在训练集和测试集的表现精度

图2 NEP-TiAlNb模型准确预测γ-TiAl在(111)面的广义层错能曲线以及层错能曲面

图3 基于NEP-TiAlNb模型研究TiAl单晶的室温塑性变形

图4 基于NEP-TiAlNb模型研究不同浓度Nb掺杂对TiAl单晶高温力学性能的影响

**论文链接：**

General-purpose neural network potential for Ti-Al-Nb alloys towards large-scale molecular dynamics with *ab initio* accuracy

https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.110.184115