انتقال‌پذیری در پتانسیل‌های بین‌اتمی برپایه یادگیری ماشینی

قاسمی، سید علی‌رضا

دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

چکیده

بر پایه تحلیل پیرامون شیمیایی کوتاه‌برد حول هر اتم یک سیستم، رهیافت‌های استاندارد یادگیری ماشین برای ساخت پتانسیل‌های بین‌اتمی مستقیما کمیت هدف یک سیستم یعنی انرژی کل را درون‌یابی می‌کنند. در حقیقت این روش‌ها به طور محض بر اساس یک مدل ریاضی کار می کنند و از هیچ گونه فرم برگرفته از فیزیک و شیمی پیروی نمی‌کنند. در نتیجه آن، این قبیل پتانسیل‌های بین‌اتمی به موجب نداشتن انتقال‌پذیری عملکرد ضعیفی نشان می‌دهند هنگامی که برای سیستم‌هایی به کار می‌روند که مشابه آن‌ها در بانک اطلاعاتی برازش‌شان نباشد. تکنیک متعادل‌سازی توسط شبکه عصبی مصنوعی یک روش بر پایه یکسان‌سازی الکترونگاتیویتی است در حالی که از ابزار قوی یادگیری ما شینی ا ستفاده می‌کند. در اینجا ما این روش را معرفی می‌کنیم و انتقال‌پذیری آن را از سی ستم‌های خوشه‌ای به فازهای بلوری بررسی می‌کنیم.

Transferability in machine learning based interatomic potentials

Ghasemi, Seyed Alireza

Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS)

Abstract

Based on an analysis of the short range chemical environment of each atom in a system, standard machine learning based approaches to the construction of interatomic potentials aim at determining directly the central quantity which is the total energy. Indeed, these methods are based on purely mathematical models and do not account for any sort of physical or chemical principles. As a consequence, such interatomic potentials perform poorly due to lack of transferability when they are applied to systems not available in the fitting database. Charge equilibration via neural network technique is a method based on electronegativity equalization method while it employs the power of machine learning techniques. Here we introduce the method and present its transferability from cluster structures to crystalline phases.