

УДК 004.822-501

МЕТОДЫ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ РЕШЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ И ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ ЗАДАЧ В ОБЛАСТИ НАНОМАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ



А.В. Баглов

Научный сотрудник
Центра 4.11
«Нанoeлектроники и новых
материалов»
НИЧ БГУИР



Л.С. Хорошко

Старший научный сотрудник НИЛ 4.5
«Нанофотоника» НИЧ БГУИР, доцент
кафедры микро- и нанoeлектроники
БГУИР, кандидат физико-
математических наук

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Республика Беларусь
E-mail: baglov@bsuir.by

А.В. Баглов

Окончил Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, аспирантуру. Работает в Центре «Нанoeлектроники и новых материалов» научно-исследовательской части БГУИР в должности научного сотрудника. Проводит научные исследования в рамках разработки наноразмерных катализаторов фотостимулированных реакций и управляемого синтеза наноматериалов.

Л.С. Хорошко

Окончила Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, кафедру радиоэлектронных средств, магистратуру и аспирантуру. Старший научный сотрудник НИЛ «Нанофотоника» научно-исследовательской части БГУИР. Область научных интересов – анализ структуры, электронных и оптических свойств новых перспективных наноматериалов для фотоники и микроэлектроники. Работает в должности доцента кафедры микро- и нанoeлектроники БГУИР (совместитель). Кандидат физико-математических наук.

Аннотация. Симбиоз классической науки и передовых информационных технологий становится все более продуктивным и востребованным для современного научно-технического прогресса и укрепления позиций белорусской науки и образования на международной арене. Нейронные сети и методы машинного обучения в общем способны снизить временные и трудовые затраты на широкий ряд материаловедческих исследований, особенно в направлении прогнозирования свойств наноматериалов и новых соединений, что особенно актуально в рамках стратегии «Наука и технологии: 2018–2040» и внедрения концепции Университета 3.0. В данной работе рассмотрен практический пример решения актуальной задачи исследования свойств материалов на примере иттрий-алюминиевых оксидов (материалы, широко используемые в лазерной технике, оптоэлектронике и др.) с привлечением методов глубокого обучения. Дан сравнительный анализ результатов, полученных нейронной сетью, с данными традиционного компьютерного эксперимента.

Ключевые слова: нейронные сети, материаловедение, нанотехнологии, наноматериалы, глубокое обучение, иттрий-алюминиевые оксиды.

Введение. Методы глубокого обучения (deep learning – DL) становятся все более популярными в задачах проектирования новых наноматериалов путем прогнозирования их свойств с точностью, близкой к точности вычислений из первых принципов, но со значительно меньшими требованиями ко времени и аппаратным ресурсам [1–3].

Многообразие форм и размеров кристаллических систем представляет собой значительную проблему, поскольку размеры необходимо представлять как вектор фиксированной длины, чтобы разрешить использование алгоритмов DL. Обычно для этого проводят ручное задание векторов фиксированной длины либо задают симметрично-инвариантных преобразования координат атомов. Однако, эти методы в первом случае достаточно трудоемки, а во втором еще и затрудняют интерпретацию в результате сложных преобразований. Однако, в 2018 г. исследователи Массачусетского технологического института предложили использовать обобщённые свёрточные нейронные сети на кристаллическом графе (*Crystal Graph Convolutional Neural Networks – CGCNN*) для представления периодических систем, которые обеспечивают как прогнозирование свойств материала с точностью расчётов, реализуемых с использованием теории функционала плотности (*Density Functional Theory – DFT*), так и химический анализ атомного уровня [4]. Авторы рассматривают соединения атомов в элементарной ячейке как граф, на котором строят свёрточные нейронные сети. CGCNN достигает такой же точности в сравнении с расчётами на основе DFT, как и DFT в сравнении с экспериментальными данными, что указывает на универсальность этого метода. В данной работе мы демонстрируем возможность применения CGCNN для оценки ширины запрещенной зоны и энергии формирования набора кристаллических соединений $Y - Al - O$ с различным типом элементарной ячейки, а также сравниваем полученные данные с известными результатами расчётов других исследователей. Данная задача является актуальной как для научного материаловедения, так и для повышения качества образования специалистов на стыке традиционного наноматериаловедения и современных информационных технологий.

Материалы и методы. В качестве материалов для прогнозирования свойств мы использовали набор из 10 соединений $Y - Al - O$ различного состава со структурой граната и перовскита. Для их исследования использовали нейронную сеть CGCNN, обучение которой проводили в течение тридцати эпох с применением фреймворка PyTorch 1.4.0. Затем проводили расчет ширины запрещенной зоны и энергии формирования соединений. Данные результатов расчетов методом DFT для сравнения брали из тестового набора авторов [4], в котором данные расчёты проводились с использованием VASP и обменно-корреляционного функционала PBE. Мы оценивали дисперсию полученных значений и разницу между среднегеометрическими значениями, полученными расчётным путем методом DFT и с помощью CGCNN.

Результаты. Полученные значения ширины запрещенной зоны и энергии формирования во всех случаях имели достаточно близкие значения (Таблица 1). Для шести соединений из десяти предсказанная CGCNN ширина запрещенной зоны оказалась меньше, нежели даёт непосредственный расчёт методом DFT. Отметим, что сочетание дисперсии 0,3 эВ для результатов DFT, 0,2 эВ для результатов CGCNN и минимального различия между среднегеометрическими значениями (0,3 %) говорит о высоком качестве прогнозирования методами DL. Аналогичные различия получены и для результатов анализа энергии формирования, что подтверждает возможность применения методов DL для быстрого анализа различных полиморфных модификаций гранатов и перовскитов.

Применительно к задачам образования и научного исследования стоит отметить значительное высвобождение времени, затраченного на предсказательную оценку, проводимую нейронной сетью. Так на оценку ширины запрещенной зоны и энергии формирования соединений $Y - Al - O$ из таблицы 1 затрачено в среднем 1–2 с, в то время как на проведение расчета DFT может потребоваться порядка 80 ч с учетом среднестатистического оснащения учебных и научно-исследовательских лабораторий. Кроме того, применение CGCNN смягчает требования к аппаратной части обеспечения учебного процесса и научных исследований, позволяя проводить анализ, в том числе, на портативных носимых персональных компьютерах, что делает, как студента, так и исследователя более

мобильным и независимым от стационарного рабочего места.

Таблица 1. – Результаты прогнозирования и расчёта свойств соединений Y – Al – O

№ п/п	Химическая формула	Пространственная группа	DFT		CGCNN	
			Ширина запрещенной зоны, эВ	Энергия формирования, эВ	Ширина запрещенной зоны, эВ	Энергия формирования, эВ
1	Y ₃ Al ₅ O ₁₂	Ia-3d	4,495	-3,702	4,334	-3,756
2	Y ₄ Al ₂ O ₉	P2 ₁ /c	4,327	-3,825	5,281	-3,655
3	Y ₄ Al ₂ O ₉	P2 ₁ /c	4,361	-3,822	4,903	-3,735
4	Y ₃ AlO ₆	Cmc2 ₁	4,375	-3,857	4,231	-3,821
5	YAlO ₃	Pnma	5,539	-3,741	4,722	-3,557
6	YAlO ₃	R-3c	4,963	-3,714	4,398	-3,737
7	Y ₃ AlO ₆	R-3c	4,704	-3,823	4,395	-3,798
8	YAlO ₃	Cmcm	4,058	-3,699	4,317	-3,709
9	YAl ₃ O ₆	C2/c	4,124	-3,533	3,61	-3,792
10	YAlO ₃	P6 ₃ /mmc	3,508	-3,657	4,3	-3,864

Заключение. Сравнительный анализ данных, полученных в результате предсказания свойств наноматериалов с использованием средств глубокого обучения и традиционного компьютерного эксперимента показывает перспективность использования нейронных сетей для решения задач наноматериаловедения. Применение нейронных сетей не является тотальной заменой методам компьютерного эксперимента, традиционно применяемым в материаловедении и также активно развивающимся и совершенствующимся в настоящее время. Однако, знание и владение методами глубокого обучения позволит оптимизировать временные и трудовые затраты на определение перспективности того или иного материала и/или группы материалов для конкретной задачи современной науки, в частности, электроники, чем будет определяться необходимость проведения дальнейших исследований с применением традиционных методов компьютерного эксперимента. Владение методами глубокого обучения особенно актуально в свете растущего влияния IT-сектора на востребованность тех или иных профессий и необходимости высокой квалификации современного инженера и исследователя, которая должна быть обеспечена ещё в процессе получения образования.

Список литературы

- [1] Prediction of low-thermal-conductivity compounds with first-principles anharmonic lattice-dynamics calculations and Bayesian optimization / A. Seko, A. Togo, H. Hayashi, K. Tsuda, L. Chaput, I. Tanaka // Physical review letters. – 2015. – Vol. 115. – P. 205901-1–205901-5.
- [2] Machine Learning Energies of 2 Million Elpasolite (A B C 2 D 6) Crystals / F. A. Faber, A. Lindmaa, O. A. von Lilienfeld, R. Armiento // Physical Review Letters. – 2016. – Vol. 117. – P. 135502-1–135502-6.
- [3] Accelerated search for materials with targeted properties by adaptive design / D. Xue, P. V. Balachandran, J. Hogden, J. Theiler, D. Xue, T. Lookman // Nature communications. – 2016. – Vol. 7. – P. 1–9.
- [4] Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties / T. Xie, J. Grossman // Physical Review Letters. – 2018. – Vol. 120. – P. 145301-1–145301-6.

DEEP LEARNING METHODS POSSIBILITIES FOR OPTIMIZATION OF THE EDUCATIONAL AND RESEARCH PROBLEMS SOLUTION IN THE FIELD OF NANOMATERIAL SCIENCE

A.V. BAGLOV

Researcher in Center of Nanoelectronics and novel materials in R&D Department, BSUIR

L.S. KHOROSHKO

PhD in Physical and Mathematical Sciences Senior researcher in SRL of Nanophotonics in R&D Department, associate professor in Micro- and Nanoelectronics Department, BSUIR

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Republic of Belarus
E-mail: baglov@bsuir.by*

Abstract. The symbiosis of classical science and advanced information technologies is becoming increasingly productive and demanded for modern scientific and technological progress and strengthening of the Belarusian science and education position in the world. Neural networks and machine learning methods in general can reduce time and labor expenditure for a wide range of materials science research, especially in the direction of the nanomaterials and new compounds properties predicting. It's especially important in the framework of the "Science and Technology: 2018–2040" strategy and the introduction of the University 3.0 concept. In this paper, we consider a practical example of solving the urgent problem of the materials properties studying by the case of yttrium-aluminum oxides (materials widely used in laser technology, optoelectronics, etc.) with the use of deep learning methods. A comparative analysis of the results obtained by the neural network with the data of a traditional computer experiment is represented.

Key words: neural networks, materials science, nanotechnology, nanomaterials, deep learning, yttrium-aluminum oxides