**Реализация алгоритма автоматического определения термодинамических свойств однокомпонентных материалов**

***Спирандэ Е.К.***

*Студент*

*Московский физико-технический институт, Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной физики, Москва, Россия*

*E-mail: spirande.ek@phystech.edu*

Термодинамические характеристики материалов, такие как энтропия, энтальпия и свободная энергия, играют важную роль в изучении фазовых переходов материалов, а анализ тепловых свойств, таких как теплоемкость и коэффициент термического расширения, необходим для прогнозирования поведения материалов при различных температурах. Исследование температурных зависимостей термодинамических свойств можно провести с помощью теории функционала плотности (ТФП), однако данный подход является крайне ресурсозатратным и позволяет моделировать системы только на масштабах не более десятков ангстрем. Также можно использовать полуэмпирические потенциалы, которые позволяют проводить многомасштабное моделирование механических свойств материалов вплоть до масштаба микрометров, однако точность полуэмпирических потенциалов не всегда бывает достаточной для предсказания термодинамических свойств материалов [2,3]. Сейчас активно используются машинно-обучаемые межатомные потенциалы, которые позволяют не только сократить количество ТФП расчетов, но и позволяют моделировать системы на больших масштабах.

В данной работе был разработан алгоритм, позволяющий автоматически рассчитывать температурные зависимости термодинамических свойств унарных материалов. Для ускорения расчетов используется машинно-обучаемый потенциал MTP (Moment Tensor Potential) [6], реализованный в пакете MLIP-2 (Machine Learning Interatomic Potentials) [4], который в ходе алгоритма предварительно обучается на данных, полученных из первых принципов, а затем обучается активно. Используя полученный потенциал, как модель для межатомного взаимодействия, проводится молекулярная динамика в изотермо-изобарическом (NPT) ансамбле, после чего алгоритм проводит анализ зависимостей энергии и объема от температуры. Применяя регрессию на основе Гауссовского процесса [5], рассчитываются температурные зависимости энергии и объема, а также их производные по температуре. Полученные данные используются для построения графиков температурной зависимости теплоемкости и коэффициента термического расширения, энтропии, энтальпии и свободной энергии для твердой и жидкой фаз материала, а также позволяет рассчитать изменение объема, энтальпии и энтропии в точке плавления [1].

Работа выполняется при поддержке гранта РНФ №23-13-00332.

**Литература**

1. Klimanova O., Miryashkin T., Shapeev A. Accurate melting point prediction through autonomous physics-informed learning // Phys. Rev. B. 2023. V. 108(18): 184103.
2. Lee B.-J., Shim J.-H., Park H. M. A semi-empirical atomic potential for the Fe-Cr binary system // Calphad. 2001. V. 25(4). P. 527-534.
3. Mendelev M.I., Kramer M.J., Becker C.A., Asta M. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu // Philos. Mag. 2008. V. 88(12). P. 1723-1750.
4. Novikov I.S. [et al.]. The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2021. V. 2(2): 025002.
5. Rasmussen C.E. and Williams C.K.I. Gaussian processes for machine learning. – MIT: The MIT Press, 2006.
6. Shapeev A.V. Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // Multiscale Model. Simul. 2016. V. 14(3). P. 1153-1173.