



UNIUNEA EUROPEANĂ



Instrumente Structurale
2014-2020

Centru Cloud si Big Data pentru Participarea la Cloud-ul European pentru Stiinta Deschisa

Realizarea de servicii si aplicatii informatice pentru suportul activitatii de modelare si simulare a nanostructurilor

George Alexandru Nemnes

IFIN-HH

Proiect cofinatat din Fondul European de Dezvoltare Regionala prin Programul Operational Competitivitate 2014-2020
Pentru informatii detaliate despre celelalte programe cofinantate de Uniunea Europeana, va invitam sa vizitati www.fonduri-ue.ro

"Continutul acestui material nu reprezinta in mod obligatoriu pozitia oficiala a Uniunii Europene sau a Guvernului Romaniei"



Obiective specifice

- Instalarea unor pachete dedicate pentru calcule *ab initio* (e.g. SIESTA) si pentru efectuarea calculelor de invatare automata (e.g. TensorFlow).
- Determinarea proprietatilor electronice prin calcule de tip high throughput, in cadrul teoriei functionalei de densitate (DFT), in sisteme quasi-zero dimensionale de tip carbon-nanoflake cu domenii de nitrura de bor hexagonala (C-BN), precum si proprietati mecanice si structurale in aliaje cu entropie ridicata (HEA).
- Dezvoltarea tehnicilor de invatare automata pentru predictia proprietatilor de interes: gap-ul energetic, energia totala, energia de coeziune, stresul mecanic si faza structurala de echilibru.
- Dezvoltarea si implementarea interfetei de acces la serviciile de modelare si simulare a nanostructurilor asigurate de platforma software gazduita de Centrul de Resurse Cloud si Big Data (CCBD).

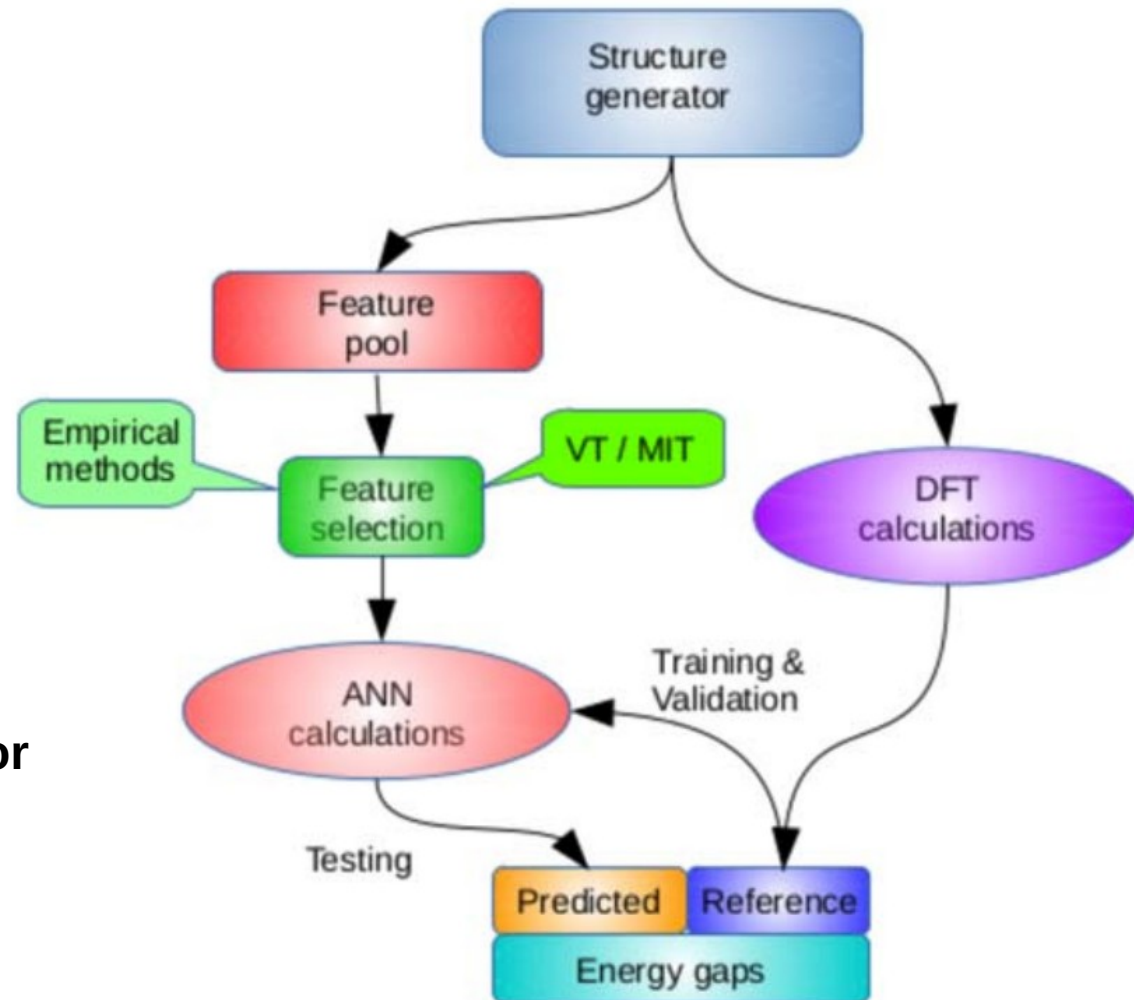
Fluxul de lucru: Calcule *ab initio* & Machine Learning

Exemplele sunt generate prin calcule DFT de tip high-throughput.

Input: informatii structurale (easy-to-get)

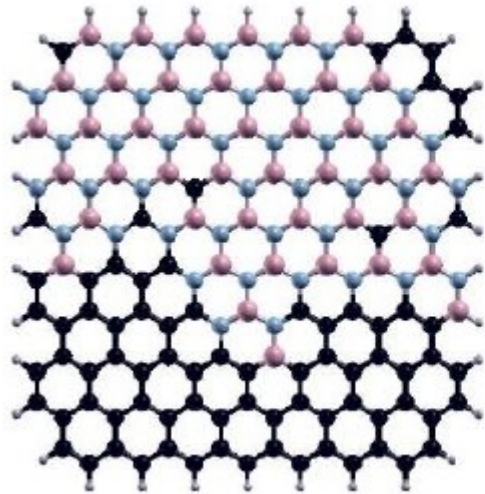
Output: proprietati electronice, mecanice etc.

Procedurile de **selectie a trasaturilor** sunt esentiale atunci cand numarul acestora devine foarte mare.

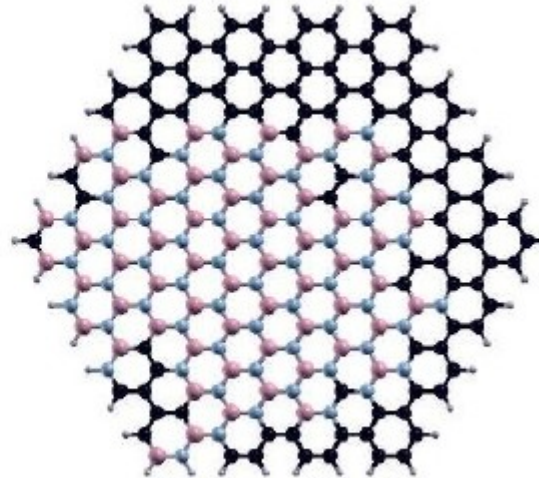


Sisteme C-BN

Sisteme quasi-0D de tip carbon nanoflakes cu incluziuni de nitrura de bor hexagonala:



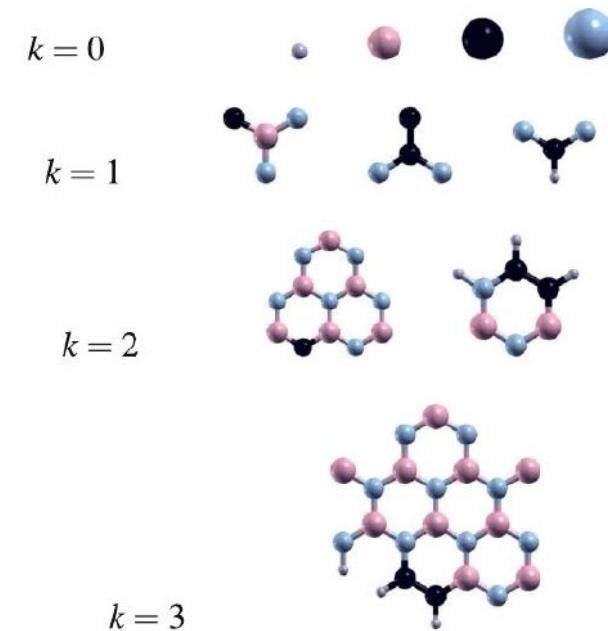
s-NF



h-NF

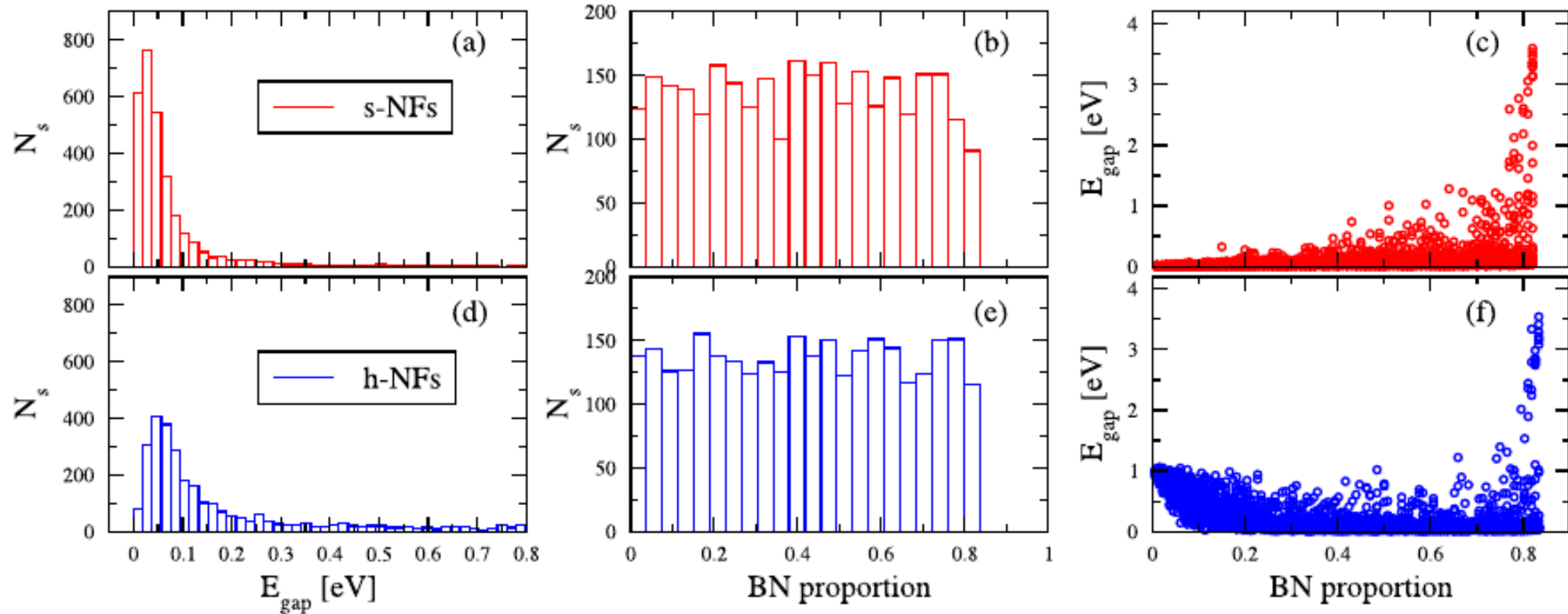
G.A. Nemnes, N. Filipoiu, V. Sipica, “*Feature selection procedures for combined density functional theory—artificial neural network schemes*”, Physica Scripta 96, 065807 (2021)

Selectia trasaturilor:



Vectorul de trasaturi: vector binar (0/1) ce indica prezenta/absenta unei trasaturi.

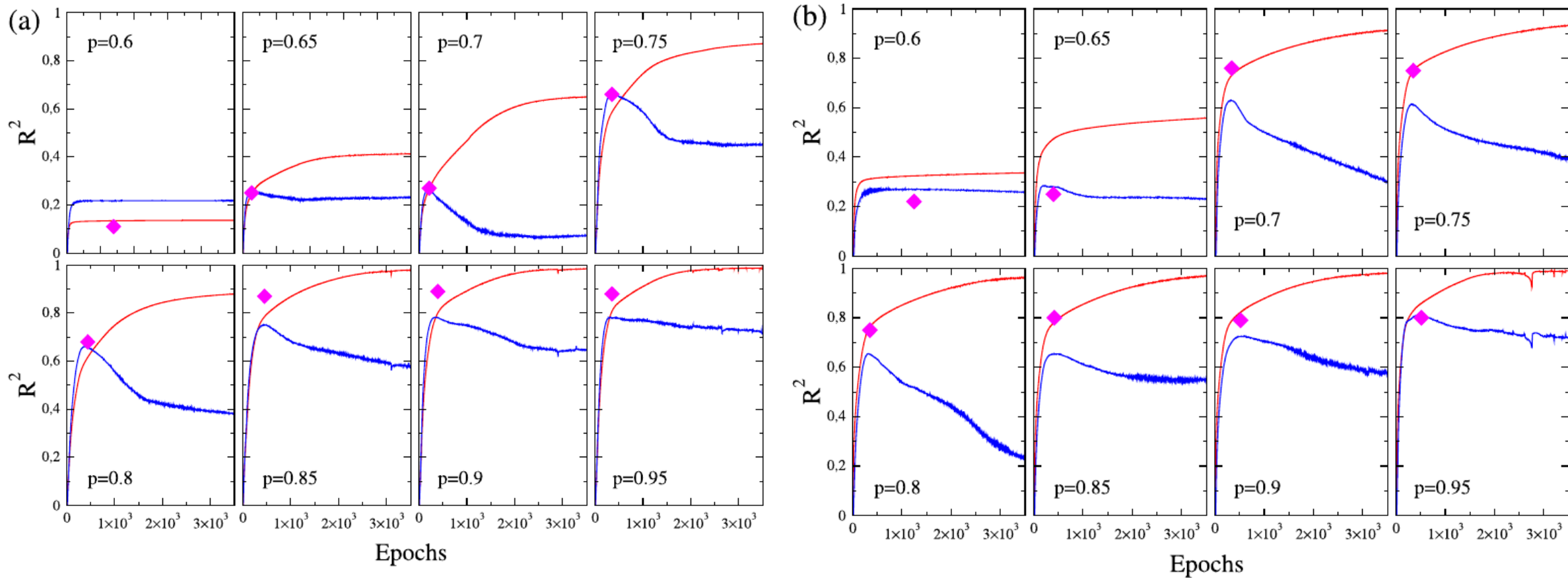
Statistica dupa gap-ul electronic si proportia de BN



- Distributie mai larga dupa gap-uri pentru h-NFs comparativ cu s-NFs
- Structurile generate au o distributie relativ uniforma in raport cu proportia de BN
- Pentru valori mici BN se observa un gap proeminent in cazul structurilor h-NFs

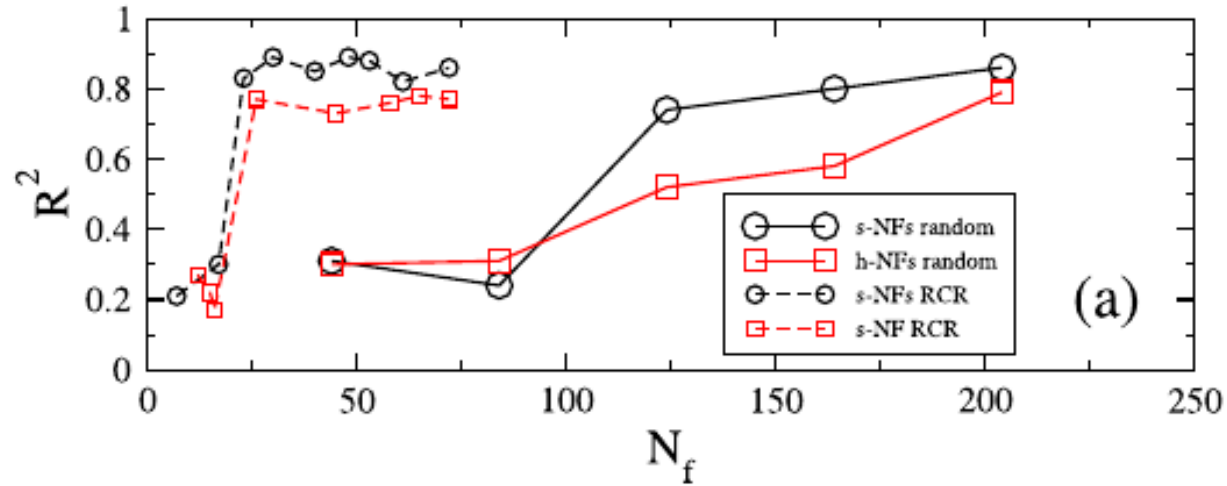
Coeficientul de determinare statistica R^2 : Training, Validation & Test

Aplicam metoda Variance Treshold (VT) pentru selectia trasaturilor:

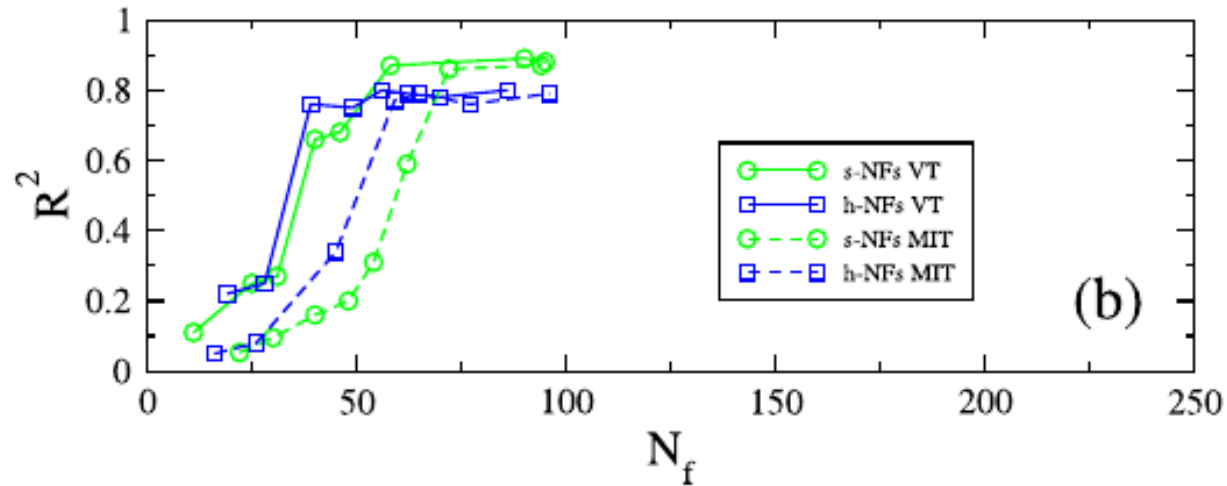


Variatia p : 0.6 – 0.95 → Nr. Trasaturi: 1/10 – 1/2 din totalul de 204

R2 - metode de selectie a trasaturilor

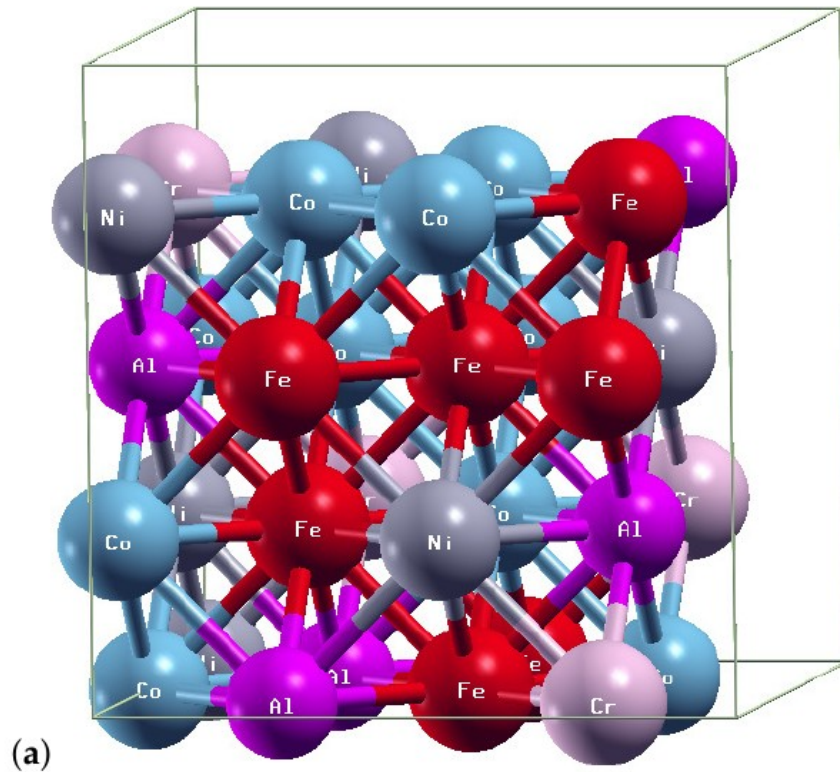


- Random selection
- Ranking of Cutting Radius

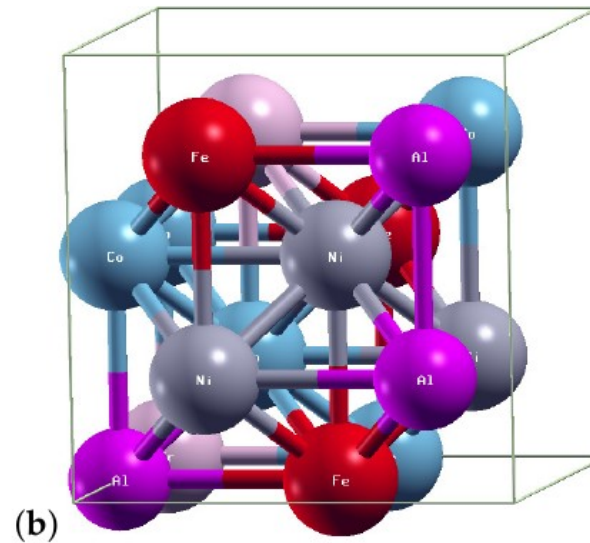


- Variance Threshold
- Mutual Information Threshold

Aliaje cu entropie ridicata (HEA)



HEA: aliaj alcatuit din cel puțin 5 elemente metalice (se pot include și unele elemente ușoare, e.g. C, Si)



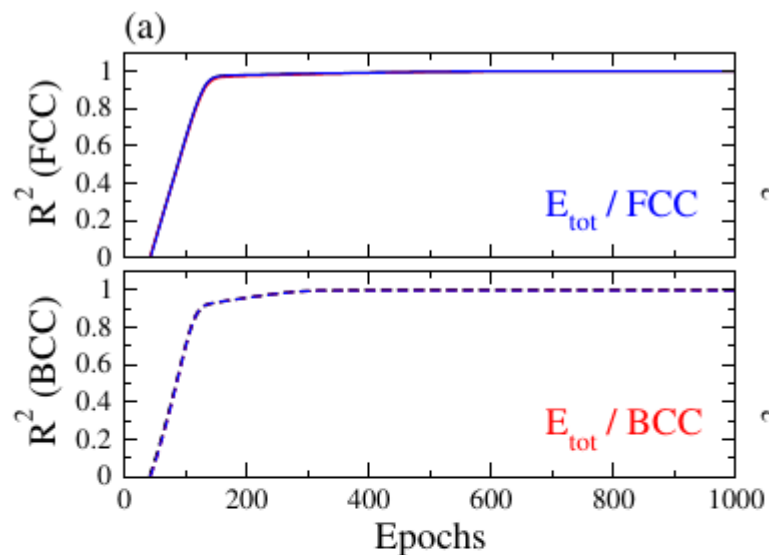
Vector de trasaturi:
→ constanta de retea (1)
→ proportii specii (5)
→ proportii (X1,X2), unde X1 și X2 sunt vecini de ordinul I (15)

Total: 21 trasaturi

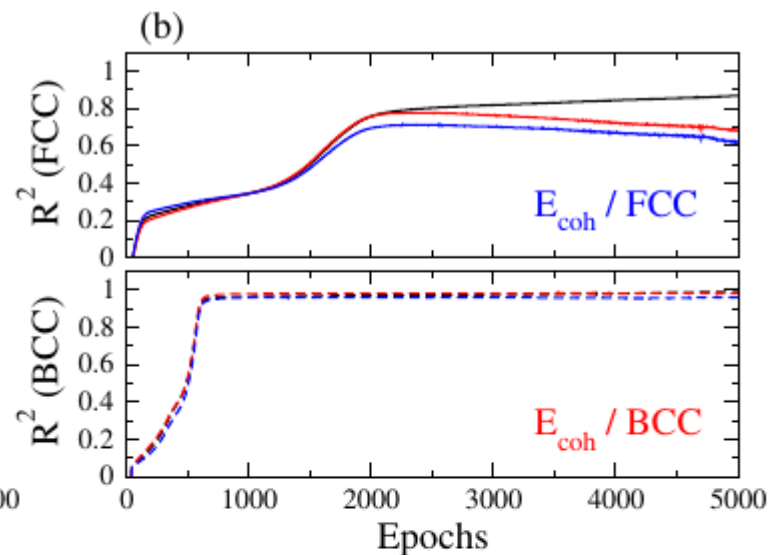
Supercelule 2x2x2 care ilustreaza configuratii tipice ale sistemului Co-Cr-Fe-Ni-Al, in faza FCC (a) si BCC (b).

Predictia proprietilor electronice, de stabilitate si mecanice

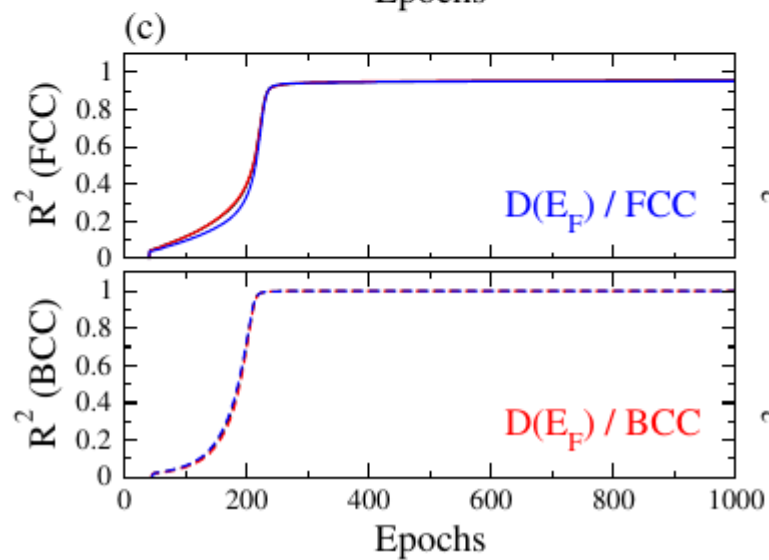
Energie
totala



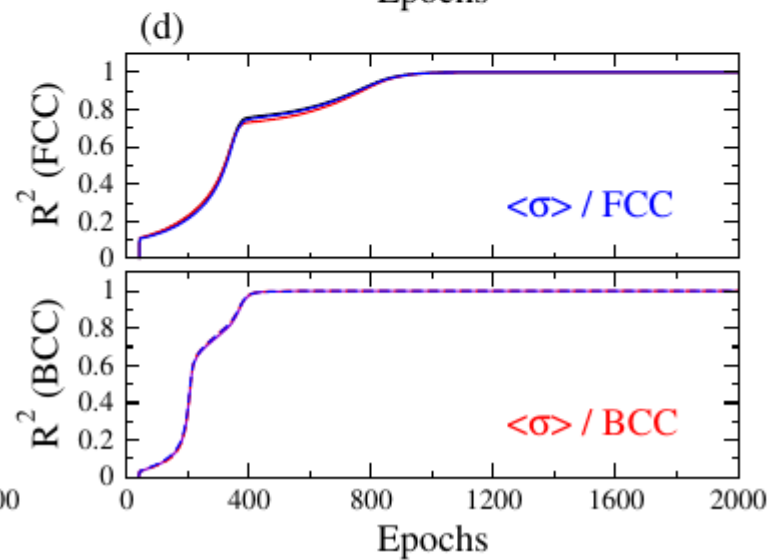
Energie
de
coeziune



Densitate
de stari

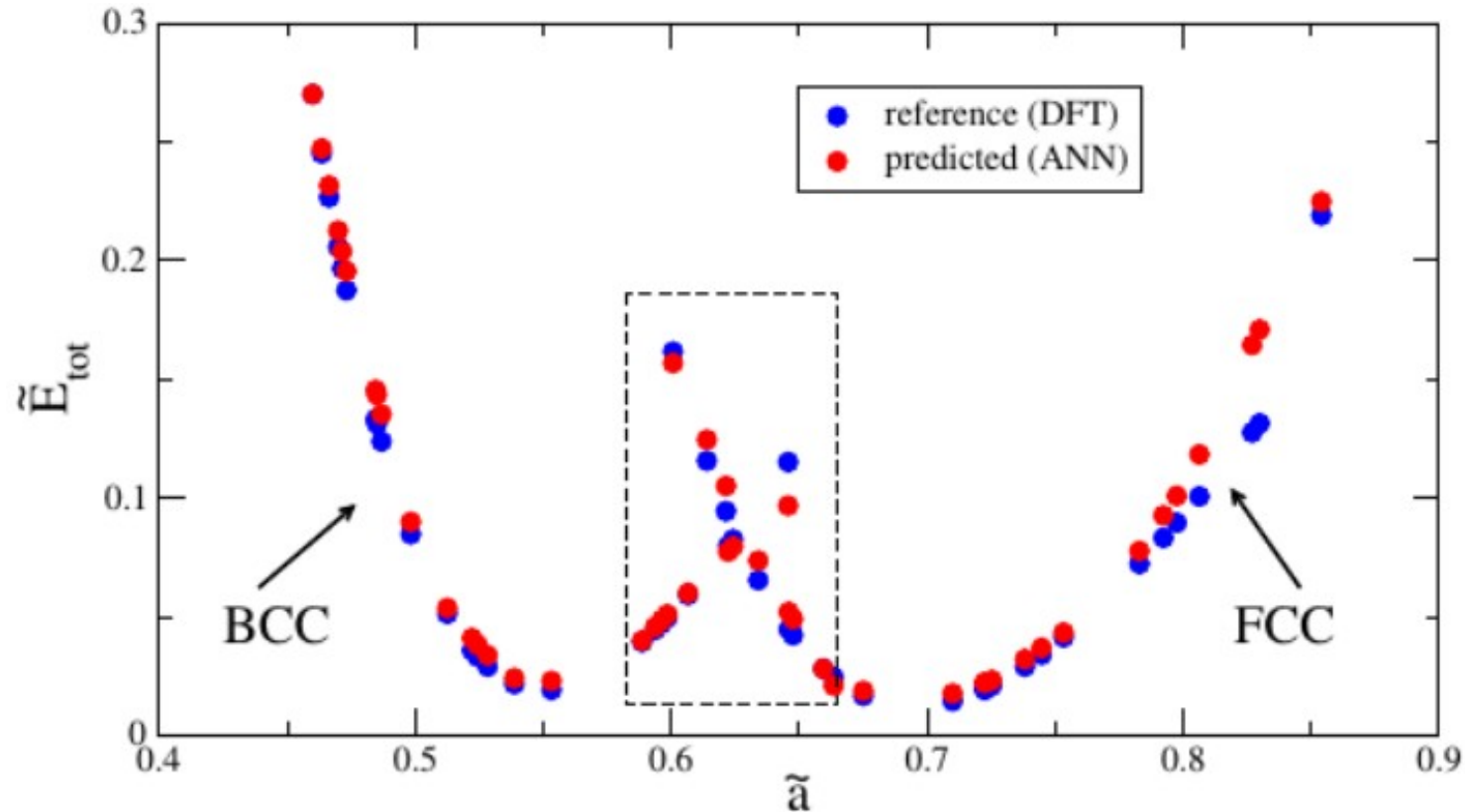


Stres
mechanic



Identificarea fazei de echilibru: FCC vs. BCC

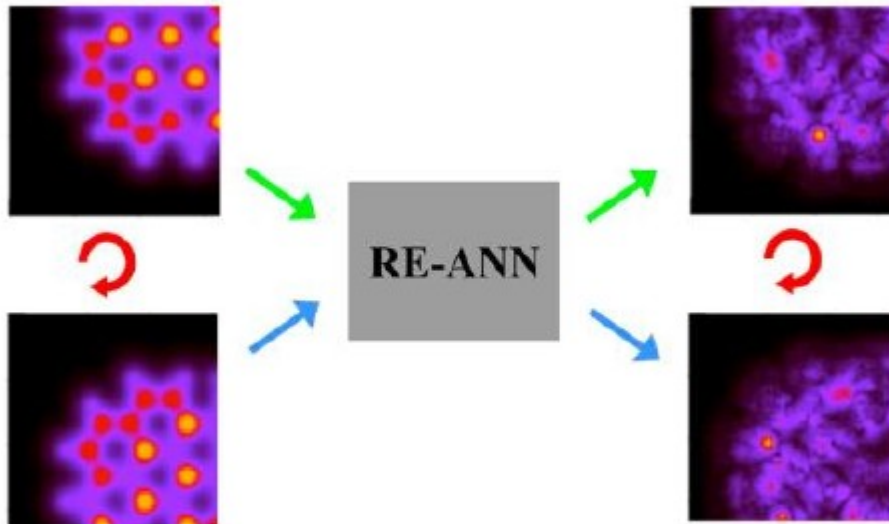
Calcul de energie totala, variind constanta de retea:



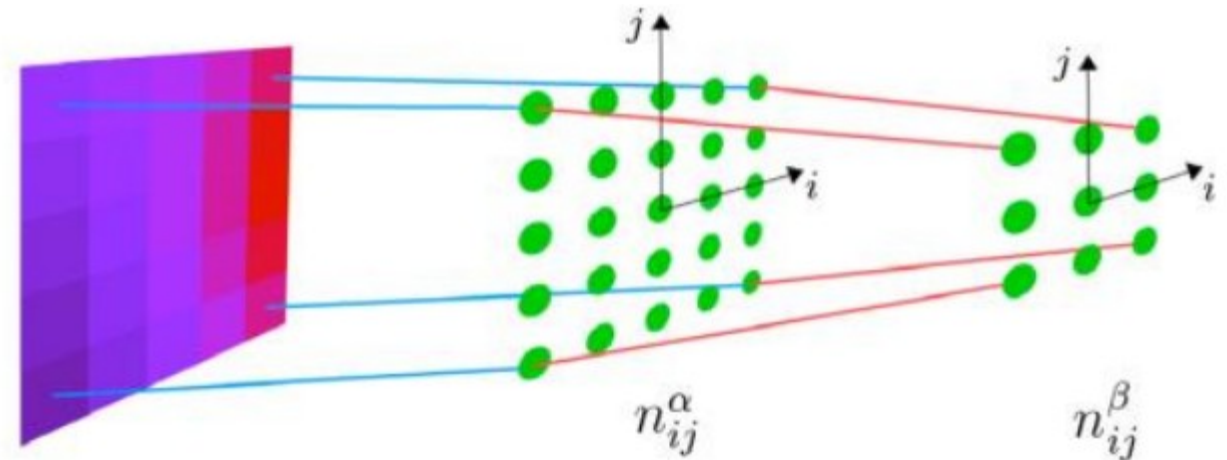
N. Filipoiu, G.A. Nemnes, "Prediction of Equilibrium Phase, Stability and Stress-Strain Properties in Co-Cr-Fe-Ni-Al High Entropy Alloys Using Artificial Neural Networks", Metals 10, 1569 (2020)

Predictia densitatii de sarcina pentru eficientizarea buclei de self-consistenta

Se realizeaza maparea densitatii initiale pe densitatea finala



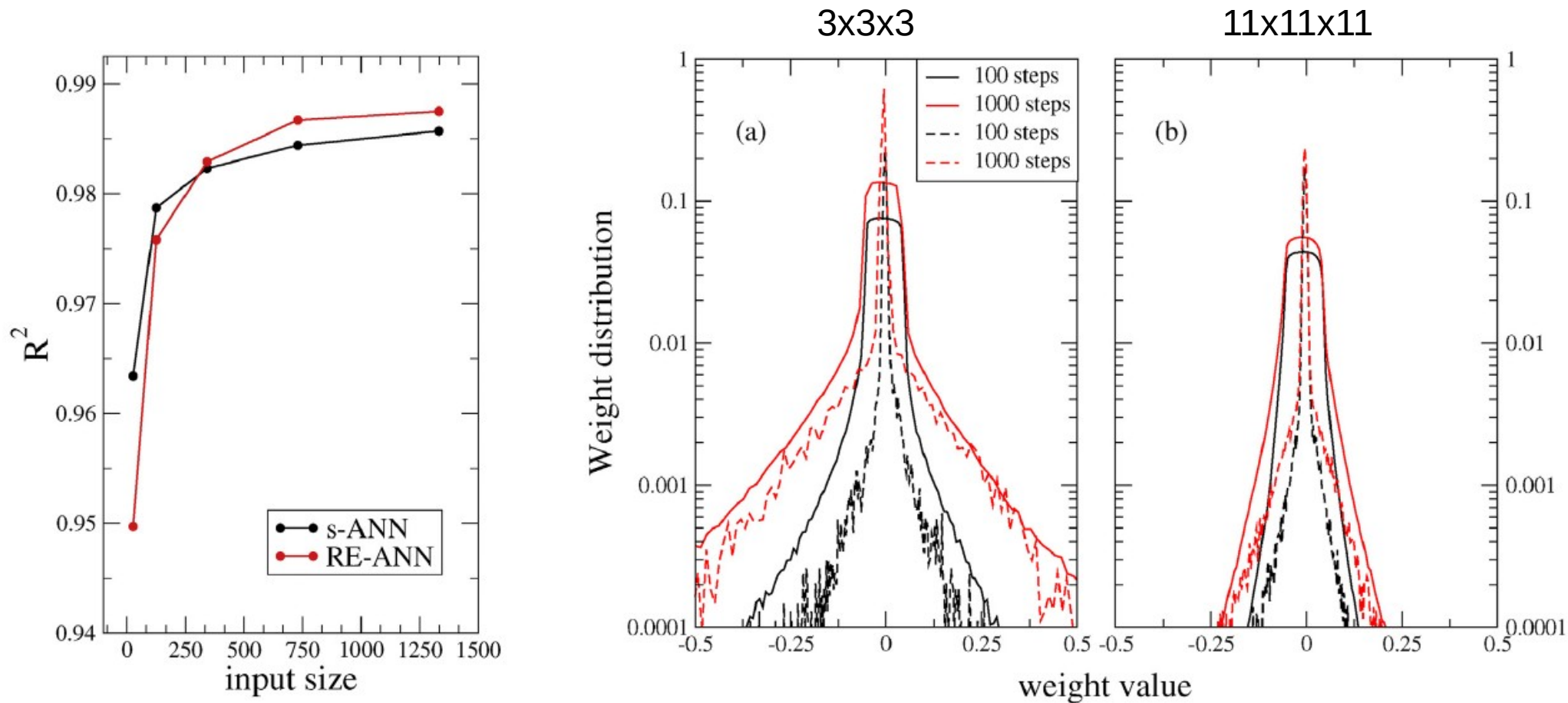
Structura REANN pe straturi (schita)



Input size: $N \times N \times N$

T.L. Mitran, G.A. Nemnes, "Ground state charge density prediction in C-BN nanoflakes using rotation equivariant feature-free artificial neural networks", Carbon, 174, 276 (2021)

ReANN vs. standard ANN



- R^2 crește în cazul REANN pentru dimensiuni mari ale input-ului
- Se observă că procesul de "weight pruning" este crescut pentru REANN vs. s-ANN

Dezvoltarea interfeței de acces la platforma de modelare a nanostructurilor

Antetul biroului virtual al utilizatorului:



- SIESTA: pachet software pentru efectuarea calculelor DFT
- CBN_ANN: aplicatie python pentru predictia gap-ului energetic in sisteme C-BN

Biroul virtual al utilizatorului

CBN_ANN

Sistemele atomice - nanofulgi rectangulari de grafena pasivata cu hidrogen pe margine

Despre CBN_ANN

Primul pas in construirea modelului de invatare automata a fost preprocesarea datelor de intrare obtinute din simularile DFT intr-o forma ideala pentru ANN.

Fiecare atom din nanostructura si vecinii sai de ordinul I au fost clasificati intr-una dintre cele 22 de clase posibile.

Aceasta distributie de clase a fost ulterior normata, dupa care am mai adaugat inca 4 neuroni pentru a reprezinta compozitia chimica.

ML Files

Name	View	Execute	Delete	Download
x.dat				
y.dat				
Energy_gap_prediction.png				
saved_models				
cbn_ann.py				

[Send Command Terminal](#) [Upload File](#)

Predictia gap-ului energetic

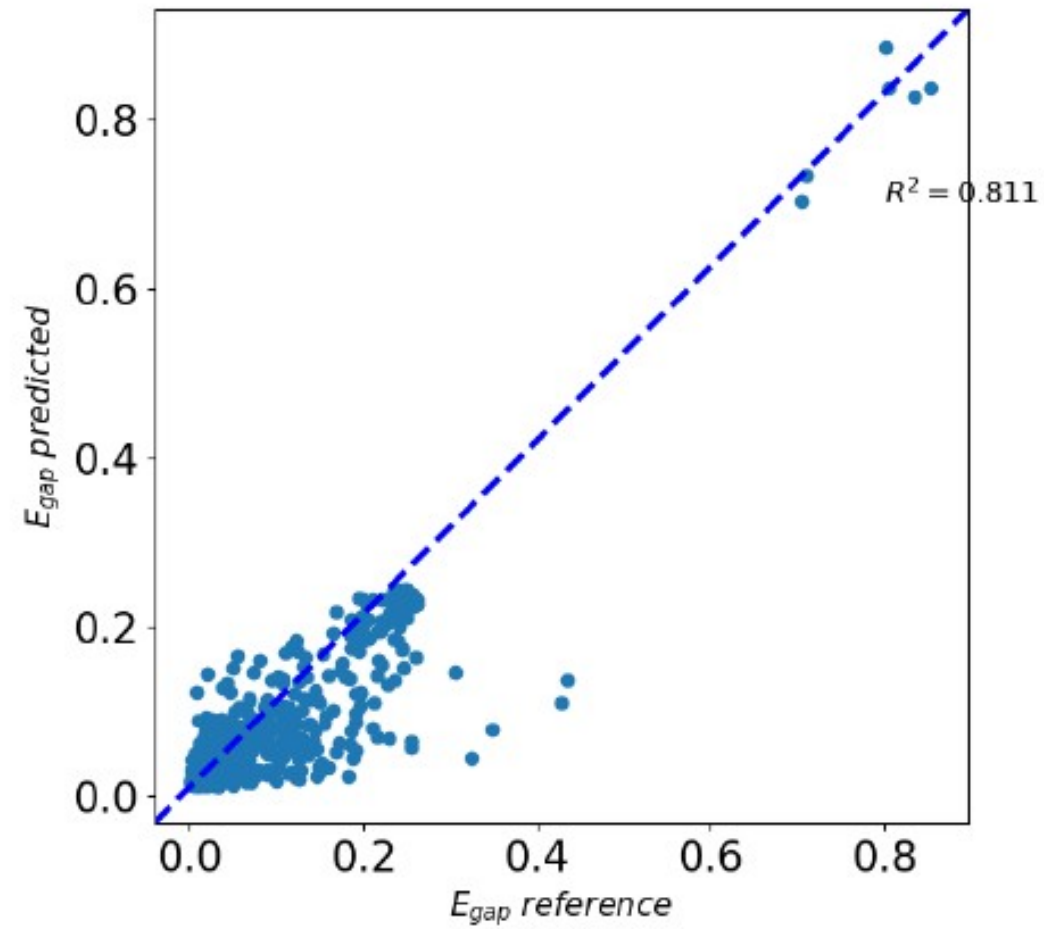


Fig. 6.3: Energy_gap_prediction.png



UNIUNEA EUROPEANĂ



Instrumente Structurale
2014-2020

CECBID-EOSC

<https://cecbid-eosc.ifin.ro>

VA MULTUMESC PENTRU ATENTIE !

Conferinta de incheiere,
28.07.2023

