

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22. № 4. С. 396-403

Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2025; 4(22): 396-403

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.22

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.002

ОБЗОР ИССЛЕДОВАНИЙ ПО АНАЛИЗУ, ТЕСТИРОВАНИЮ И МАШИННОМУ ОБУЧЕНИЮ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД

Косарев Игорь Витальевич^{1†}, Хазимуллин Максим Вильевич²,
Дмитриев Сергей Владимирович³

Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 71, 450054, Уфа, Россия

¹ igor.v.kosarev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4652-7732>

² maximhk@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9713-7067>

³ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Аннотация. Молекулярная динамика (МД) – мощный инструмент для исследования материалов, позволяющий работать с миллионами и более атомов. Однако в молекулярной динамике качество межатомного потенциала имеет ключевое значение. Для анализа и тестирования широкого спектра потенциалов предлагается использовать делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ). ДНКМ представляют собой точные решения уравнения движения атомов, полученные на основе симметрии структуры, и, в отличие от анализа, основанного исключительно на фоновых модах, допускают колебания в широком диапазоне амплитуд и включают как линейную (фононную), так и нелинейную части колебания. Такой подход позволяет тестировать потенциалы как с точки зрения линейной, так и нелинейной физики. Потому в данной работе представлен обзор на две работы с исследованием ДНКМ в ОЦК вольфраме. В одной из которых проводится сравнение существующих потенциалов относительно данных *ab initio*, а в другой уже представлен машинно-обученный потенциал с применением ДНКМ и показана разница в воспроизводимости ДНКМ в широком спектре амплитуд.

Ключевые слова: делокализованная нелинейная колебательная мода, машинное-обучение, молекулярно-динамическое моделирование, ОЦК металл.

Благодарности: Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 24-11-00139

Для цитирования: Косарев И. В., Хазимуллин М. В., Дмитриев С.В. Обзор исследований по анализу, тестированию и машинному обучению межатомных потенциалов с применением делокализованных нелинейных колебательных мод // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 4. С. 396-403. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.002.

Original article

A REVIEW OF RESEARCH ON ANALYSIS, TESTING, AND MACHINE LEARNING OF INTERATOMIC POTENTIALS USING DELOCALIZED NONLINEAR VIBRATIONAL MODES

Igor V. Kosarev^{1†}, Khazimullin M. Vilievich², Sergey V. Dmitriev³

Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Ave., 71, Ufa, 450054, Russia

¹ igor.v.kosarev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4652-7732>

² maximhk@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9713-7067>

³ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Abstract. Molecular dynamics (MD) is a powerful tool for materials research, allowing one to work with millions or more atoms. However, in molecular dynamics, the quality of the interatomic potential is crucial. To analyze and test a wide range of potentials, we propose using delocalized nonlinear vibrational modes (DNVMs). DNVMs are exact solutions to the equation of atomic motion obtained based on the symmetry of the structure and, unlike analysis based solely on phonon modes, allow vibrations over a wide range of amplitudes and include both the linear (phonon) and nonlinear parts of the vibration. This approach allows testing potentials from both linear and nonlinear physics perspectives. Therefore, this paper presents a review of two studies investigating DNVMs in BCC tungsten. One of them compares existing potentials with respect to ab initio data, while the other already presents a machine-trained potential using DNVM and shows the difference in DNVM reproducibility over a wide range of amplitudes.

Keywords: delocalized nonlinear vibrational mode, machine learning, molecular dynamics simulation, BCC metal.

Acknowledgements: The work was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 24-11-00139

For citation: Kosarev I.V., Khazimullin M. V. & Dmitriev S. V. (2025). A review of research on analysis, testing, and machine learning of interatomic potentials using delocalized nonlinear vibrational modes. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(4), 396-403. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.002.

Введение

Молекулярная динамика является одним из важных методов современного теоретического материаловедения [1, 2]. Этот метод основан на потенциале, описывающем межатомные взаимодействия. Поэтому качество потенциала имеет решающее значение для изучения материала. Существует два типа потенциалов: немашинно-обученные [3, 4] и машинно-обученные [5, 6]. Немашинно-обученные потенциалы представляют собой предопределенные аналитические функции с настраиваемыми параметрами или же сплайн-аппроксимации с настраиваемыми коэффициентами. Эти параметры и коэффициенты могут быть основаны на экспериментальных или теоретических данных, а иногда и объединять их. Немашинно-обученные потенциалы часто имеют узкую область применимости, в пределах которой полученные данные как качественно, так и количественно воспроизводятся экспериментальными данными. Однако это приводит к противоречиям при использовании для других целей. Ма-

шинно-обученные потенциалы в основном обучаются на данных ab initio. Такой подход обеспечивает хорошую качественную воспроизводимость широкого спектра характеристик материалов по сравнению с экспериментами. Однако существуют количественные расхождения из-за расхождений между ab initio и экспериментальными данными. Тем не менее, потенциалы машинного обучения зависят от выбора обучающих данных; следовательно, они могут не обеспечить желаемого соответствия в областях, где обучающий набор данных не содержит данных.

Оба метода многократно сравнивались [7, 8], но независимо от метода, существует необходимость в проверке существующих потенциалов в широком диапазоне применимости. Для этой цели предлагается использование делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ/DNVM) [9]. ДНКМ являются точными решениями уравнения движения, зависящего от симметрии молекул [10] и кристаллов [11–15]. Конечно, сами частоты колебаний зависят от материала, но используемые паттерны колеба-

ний характерны для всех материалов с одинаковой симметрией, например, одни и те же ДНКМ использовались для вольфрама [16] и ванадия [17]. ДНКМ получены из теории фазовых переходов и допускают колебания как в линейном (гармоническом), так и в нелинейном (ангармоническом) приближениях. В линейном приближении ДНКМ являются фоновыми модами, в то время как несколько различных ДНКМ могут представлять одну и ту же фоновую моду в линейном приближении и быть разными в нелинейном [18].

Таким образом, ДНКМ позволяют тестировать потенциалы в широком диапазоне амплитуд, используя точные решения уравнений движения. При этом в линейной части анализируются сразу несколько вариантов одной и той же фоновой моды, что позволяет анализировать адекватность применяемого межатомного потенциала. Ещё одним преимуществом метода является анализ различных точек первой зоны Бриллюэна, анализируются как точки высокой симметрии на границе зоны Бриллюэна, так и в глубине. Обычно данные о дисперсионных кривых фононов внутри зоны Бриллюэна получают интерполяцией, но ДНКМ позволяют анализировать их напрямую и сравнивать данные из первых принципов с данными молекулярной динамики. ДНКМ отражают гамильтониан как функцию амплитуды одновременно в широком диапазоне. Таким образом, ДНКМ позволяют анализировать потенциал не только в терминах амплитудно-частотных характеристик (АЧХ), но и в виде энергетических профилей смещений, соответствующих определённым колебаниям, а также профилей сил. Нахождение длинноволновых ДНКМ также позволяет оценить упругие компоненты в материале. Ранее ДНКМ уже использовались для построения дискретных брызгов [19–23] в скалярной квадратной решетке [24], в треугольных и квадратных β -FPUT-решетках [25, 26], в ОЦК-металлах [27] и в структуре B2 [28].

Как упоминалось ранее, одним из современных методов создания межатомных потенциалов является машинное обучение (МО). МО демонстрирует отличную сходимость с данными, на которых оно обучалось. Обычно в качестве основы выбираются данные *ab-initio* расчетов, поскольку они дают наиболее полную картину поведения материала, а для МО важно, чтобы в данных не было пробелов. В то же время существуют различные модели МО. Од-

ной из самых ранних моделей является нейронная сеть Белера-Парринелло [29]. Основная идея этой модели заключается в использовании искусственных нейронных сетей для сравнения описания локального окружения атома с его вкладом в атомную энергию. Другой класс моделей — модели на основе ядра [30]. Основная идея заключается в использовании ядерной регрессии (например, регрессии гауссовского процесса — GPR) для прогнозирования энергии. Сходство атомных окружений (измеренное функцией ядра) определяет прогнозирование. В данной работе мы будем использовать один из потенциалов, представляющих эту модель, — потенциалы гауссовой аппроксимации (GAP) [31]. Другая модель — линейные модели с многомерными дескрипторами [32, 33]. Эта модель использует линейную регрессию (или полиномиальную регрессию низкого порядка) с очень сложными многомерными дескрипторами, которые неявно отражают сложные атомные взаимодействия. В качестве дескриптора мы можем использовать потенциал тензора момента (MTP). Ранее была проделана работа по созданию межатомного потенциала с учётом ДНКМ-зависимой модели [34] с использованием межатомного потенциала машинного обучения (MLIP) [35, 36].

Сравнение АЧХ существующих потенциалов относительно расчётов *ab-initio* на примере вольфрама

В работе [16] на примере вольфрама проанализированы 14 однокомпонентных коротковолновых ДНКМ объемно-центрированной решётки, волновые вектора которых при малых амплитудах принадлежат точкам на границе зоны Бриллюэна. Сравнивались 9 потенциалов, один из которых машинно-обученный [37–44] и данные *ab-initio* молекулярной динамики (AIMD). При этом показано, что эти 14 ДНКМ выделяются в 4 группы при малых амплитудах.

Рассмотрим ДНКМ 2 из группы 1 на рис. 1.

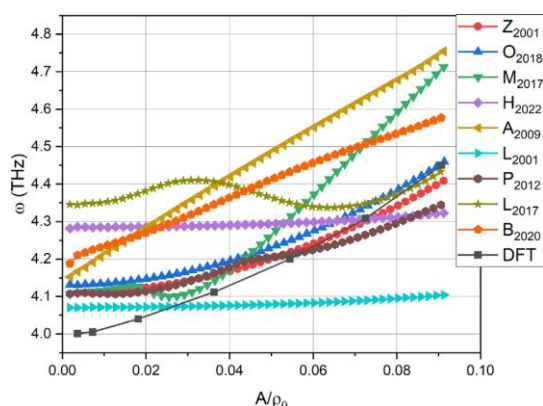


Рис. 1. Сравнение АЧХ ДНКМ 2 для МД потенциалов и расчётов AIMD, в легенде буквами обозначена первая буква фамилии автора потенциала, а цифрами год публикации, данные AIMD обозначены DFT (density functional theory) [16].

Fig. 1. Comparison of the frequency response of DNVM 2, the letters indicate the first letter of the author's surname of the potential, and the numbers indicate the year of publication, ab-initio data are designated DFT (density functional theory) [16].

На рис. 1 приводится сравнение АЧХ ДНКМ 2 для девяти потенциалов и данных ab-initio. В линейной (гармонической) части, которой соответствуют малые амплитуды характерно можно наблюдать «полочку», область, где частота не зависит от амплитуды. Затем проявляется нелинейность (ангармонизм) колебания и мы видим нелинейность. Нелинейность бывает жёсткого и мягкого типов. Жесткий тип нелинейности подразумевает увеличение частоты с увеличением амплитуды, а мягкий наоборот уменьшение частоты с ростом амплитуды.

Для большинства потенциалов и данных DFT мы видим данную «полочку» и последующее проявление нелинейности. При этом наилучшее качественное соответствие данным DFT для ДНКМ 2 показывают потенциалы Z₂₀₀₁ и O₂₀₁₈, а потенциалы A₂₀₀₉ и машинно-обученный B₂₀₂₀ и вовсе демонстрируют отсутствие «полочки» и линейную зависимость частоты от амплитуды. При этом по большей части все потенциалы показывают жесткий тип нелинейности. В качестве исключений можно выделить L₂₀₀₁ и H₂₀₂₂, у которых очень слабая нелинейность, однако всё же жесткого типа, а второй L₂₀₁₇, у которого тип нелинейности меняется несколько раз с ростом амплитуды. Перейдём к рассмотрению группы 2 на примере ДНКМ 6 на рис. 2.

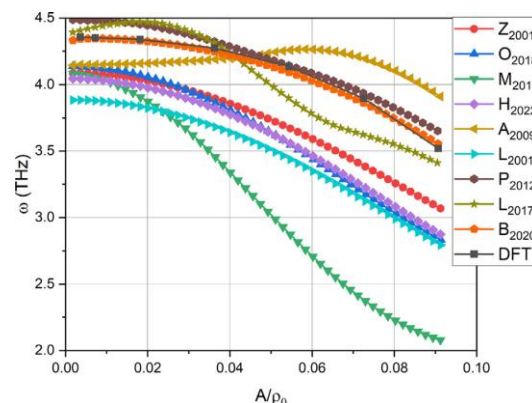


Рис. 2. Сравнение АЧХ ДНКМ 6 для МД потенциалов и расчётов AIMD, в легенде буквами обозначена первая буква фамилии автора потенциала, а цифрами год публикации, данные AIMD обозначены DFT (density functional theory) [16].

Fig. 2. Comparison of the frequency response of DNVM 6, the letters indicate the first letter of the author's surname of the potential, and the numbers indicate the year of publication, ab-initio data are designated DFT (density functional theory) [16].

Почти все потенциалы и данные AIMD демонстрируют мягкий тип нелинейности, за исключением A₂₀₀₉, который демонстрирует жёсткий тип нелинейности вплоть до больших частот, где демонстрирует мягкий тип нелинейности. При этом остальные потенциалы и AIMD демонстрируют увеличение нелинейности с ростом амплитуды, за исключением потенциалов M₂₀₁₇ и L₂₀₁₇. Стоит отметить, что такое однозначное поведение ДНКМ в модах данной группы является характерным и подтверждается на примере ванадия в работе [17]. При этом видно, что МО потенциал B₂₀₂₀ демонстрирует не только качественную сходимость, но и полную количественную сходимость.

Анализ машинно-обученного межатомного потенциала вольфрама с применением ДНКМ

В работе [16] также анализируются и остальные группы мод, однако уже на приведённых примерах видно, что даже МО потенциалы не всегда полностью воспроизводят нелинейную компоненту колебаний. Что поднимает вопрос о расширении данных и подходов как к анализу существующих, так и к созданию новых потенциалов.

В работе [34] была проведена работа по машинному обучению межатомного потенциала с учётом упомянутых ранее 14 коротковолновых ДНКМ.

В данной работе был развит метод применения ДНКМ при обучении потенциала, а также приведён машинно-обученный потенциал, обученный на случайных конфигурациях, подобных ДНКМ по количеству смещаемых атомов, чтобы продемонстрировать влияние ДНКМ и отсутствие случайной воспроизводимости ДНКМ.

На рис. 3 из работы [34] приведены сравнения данных АЧХ для четырёх ДНКМ, принадлежащих разным группам, между МО потенциалом с применением ДНКМ ($MLIP_{DNVM(W)}$), МО потенциалом на аналогичном количестве конфигураций без ДНКМ ($MLIP_W$), сторонним МО обученным потенциалом (B2020 GAP) [44], который также ранее упоминался в данной работе и демонстрировался на рисунках 1 и 2, как B2020. Все эти потенциалы сравнивались с данными ab-initio, полученными на основе статичных расчётов (SCF).

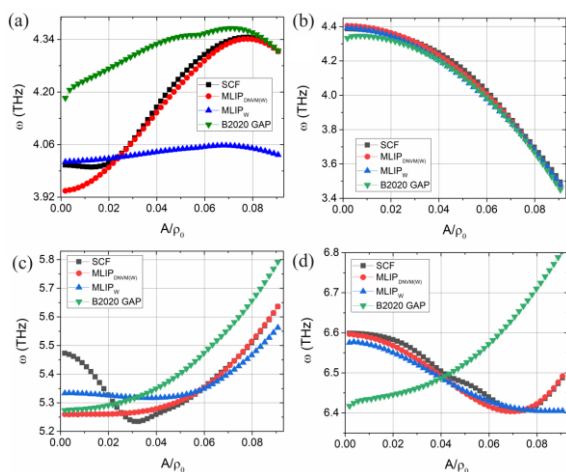


Рис. 3. АЧХ ДНКМ (a) #1, (b) #5, (c) #9 и (d) #11 полученных с помощью DFT SCF, $MLIP_{DNVM(W)}$, $MLIP_W$ и B2020 GAP [34].

Fig. 3. Frequency response of DNVMs (a) #1, (b) #5, (c) #9 and (d) #11 obtained via DFT SCF, $MLIP_{DNVM(W)}$, $MLIP_W$ and B2020 GAP. [34].

Как видно из рис. 3 некоторые моды всё ещё не удалось воспроизвести полностью, однако заметно, что потенциал $MLIP_{DNVM(W)}$ воспроизводит ДНКМ однозначно лучше, чем другой МО потенциал B2020 GAP и потенциал без ДНКМ $MLIP_W$. При этом наилучшее воспроизведение достигнуто в области высоких амплитуд,

что является ключевым для исследований явлений нелинейной физики кристалла. А все несоответствия приходится на область низких амплитуд, что связано с большим влиянием точности расчётов при низких амплитудах и сглаживанием некоторых данных полиномами при обучении.

Выводы

Рассмотрены две работы, посвящённые изучению ДНКМ и межатомным потенциалам. В первой работе продемонстрированы существующие проблемы существующих потенциалов при рассмотрении их поведения в широком спектре амплитуд. Во второй работе продемонстрирован МО потенциал с учётом ДНКМ.

Из работы [16] видно, что потенциалы, без учёта ДНКМ не воспроизводят нелинейную компоненту. Иногда наблюдалась линейная зависимость частоты от амплитуды, что категорически разнилось с данными ab initio. В некоторых случаях потенциалы демонстрировали другой тип нелинейности.

В работе [34] показано, что учёт ДНКМ при создании потенциала позволяет воспроизвести нелинейную компоненту колебания, что является ключевым в исследованиях явлений нелинейной физики, а также важным для более полного исследования и понимания материалов.

Рассмотренные работы поднимают важный вопрос более полного исследования существующих потенциалов и создания новых. А также, как упоминалось ранее выявлении общих закономерностей между материалами одинаковой структуры. Как, например, группа ДНКМ 2 в вольфраме, одна из мод которых продемонстрирована на рис. 2, демонстрирует аналогичное поведение и в ванадии [17], при этом такое поведение демонстрируют большинство потенциалов, а также потенциал $MLIP_W$ из работы [34], который не обучался на ДНКМ, что приводит нас к выводу, что данное поведение является скорее свойством структуры, нежели особенностью ДНКМ.

Список литературы

1. M. E. Tuckerman and G. J. Martyna, "Understanding modern molecular dynamics: Techniques and applications," (2000).
2. R. Khan, Journal of Materials Science and Chemical Engineering 11, 1 (2023).

3. K. Choudhary, F. Y. P. Congo, T. Liang, C. Becker, R. G. Hennig, and F. Tavazza, *Scientific data* 4, 1 (2017).
4. A. Cherednichenko, P. Zakharov, M. Starostenkov, A. Eremin, and G. Dong, *Technical Physics Letters* 48, 245 (2022).
5. P. Friederich, F. Hase, J. Proppe, and A. Aspuru-Guzik, *Nature Materials* 20, 750 (2021).
6. V. Eyert, J. Wormald, W. A. Curtin, and E. Wimmer, *Journal of Materials Research* 38, 5079 (2023).
7. N. Mola, H. Weishaupt, V. Krasontovitsch, E. Hodneland, and S. Leh, *Scientific Reports* 15, 27700 (2025).
8. R. Wang, X. Ma, L. Zhang, H. Wang, D. J. Srolovitz, T. Wen, and Z. Wu, *Phys. Rev. Mater.* 6, 113603 (2022).
9. G. Chechin and V. Sakhnenko, *Physica D: Nonlinear Phenomena* 117, 43 (1998).
10. G. Chechin, D. Ryabov, and S. Shcherbinin, *Physical Review E* 92, 012907 (2015).
11. S. Shcherbinin, A. Kazakov, Y. V. Bebikhov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, *Physical Review E* 109, 014215 (2024).
12. G. Chechin and D. Ryabov, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 120, 107176 (2023).
13. D. S. Ryabov, G. Chechin, E. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. Korznikova, and S. V. Dmitriev, *Nonlinear Dynamics* 111, 8135 (2023).
14. E. A. Korznikova, S. A. Shcherbinin, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. G. Ekomasov, E. Barani, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, *physica status solidi (b)* 256, 1800061 (2019). 14
15. S. A. Shcherbinin, K. A. Krylova, G. M. Chechin, E. G. Soboleva, and S. V. Dmitriev, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 104, 106039 (2022).
16. I. Kosarev, S. Shcherbinin, A. Kistanov, R. Babicheva, E. Korznikova, and S. Dmitriev, *Computational Materials Science* 231, 112597 (2024).
17. I. Kosarev, E. Korznikova, and S. Dmitriev, *Procedia Structural Integrity* 65, 127 (2024).
18. G. Chechin and D. Ryabov, *Letters on Materials* 10, 523 (2020).
19. S. Flach and C. R. Willis, *Physics reports* 295, 181 (1998).
20. S. Flach and A. V. Gorbach, *Physics Reports* 467, 1 (2008).
21. S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, Y. A. Baimova, and M. G. Velarde, *Physics-Uspekhi* 59, 446 (2016).
22. P. Zakharov, E. Korznikova, S. Dmitriev, E. Ekomasov, and K. Zhou, *Surface Science* 679, 1 (2019).
23. R. Murzaev, A. Kistanov, V. Dubinko, D. Terentyev, and S. Dmitriev, *Computational Materials Science* 98, 88 (2015).
24. G. Bezuglova, G. Chechin, and P. Goncharov, *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* 84, 036606 (2011).
25. R. I. Babicheva, A. S. Semenov, E. G. Soboleva, A. A. Kudreyko, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, *Physical Review E* 103, 052202 (2021).
26. D. S. Ryabov, I. V. Kosarev, D. Xiong, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, *Computers, Materials & Continua* 82 (2025).
27. K. Krylova, I. Lobzenko, A. Semenov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, *Computational Materials Science* 180, 109695 (2020).
28. D. Abdullina, I. Kosarev, R. Evarestov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, *Chaos, Solitons & Fractals* 199, 116724 (2025).
29. J. Behler and M. Parrinello, *Physical review letters* 98, 146401 (2007).
30. T. Hofmann, B. Schölkopf, and A. J. Smola, (2008).
31. A. P. Bartók, M. C. Payne, R. Kondor, and G. Csányi, *Physical review letters* 104, 136403 (2010).
32. N. Matloff, *Statistical regression and classification: from linear models to machine learning* (Chapman and Hall/CRC, 2017).
33. E. V. Podryabinkin and A. V. Shapeev, *Computational Materials Science* 140, 171 (2017). 15
34. A. A. Kistanov, I. V. Kosarev, S. A. Shcherbinin, A. V. Shapeev, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, *Materials Today Communications* 42, 111437 (2025).
35. I. S. Novikov, K. Gubaev, E. V. Podryabinkin, and A. V. Shapeev, *Machine Learning: Science and Technology* 2, 025002 (2020).
36. E. Podryabinkin, K. Garifullin, A. Shapeev, and I. Novikov, *The Journal of Chemical Physics* 159 (2023).
37. X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L. Martens, T.F. Kelly, *Acta Mater.* 49 (19) (2001) 4005–4015.
38. P.A.T. Olsson, *Comput. Mater. Sci.* 47 (1) (2009) 135–145.

39. D.R. Mason, D. Nguyen-Manh, C.S. Becquart, J. Phys.: Condens. Matter 29 (50) (2017) 505501.
40. P. Hiremath, S. Melin, E. Bitzek, P.A.T. Olsson, Comput. Mater. Sci. 207 (2022) 111283.
41. G.J. Ackland, X. Huang, K.M. Rabe, Phys. Rev. B 68 (21) (2003) 214104.
42. B.-J. Lee, M.I. Baskes, H. Kim, Y.K. Cho, Phys. Rev. B 64 (18) (2001) 184102.
43. H. Park, M.R. Fellinger, T.J. Lenosky, W.W. Tipton, D.R. Trinkle, S.P. Rudin, C. Woodward, J.W. Wilkins, R.G. Hennig, Phys. Rev. B 85 (21) (2012) 214121.
44. https://openkim.org/id/MEAM_LAMMPS_Lenosky_2017_W_MO_999198119251_001.
45. J. Byggmästar, K. Nordlund, F. Djurabekova, Phys. Rev. Mater. 4 (2020) 093802.
7. N. Mola, H. Weishaupt, V. Krasontovitsch, E. Hodneland, and S. Leh, Scientific Reports 15, 27700 (2025).
8. R. Wang, X. Ma, L. Zhang, H. Wang, D. J. Srolovitz, T. Wen, and Z. Wu, Phys. Rev. Mater. 6, 113603 (2022).
9. G. Chechin and V. Sakhnenko, Physica D: Nonlinear Phenomena 117, 43 (1998).
10. G. Chechin, D. Ryabov, and S. Shcherbinin, Physical Review E 92, 012907 (2015).
11. S. Shcherbinin, A. Kazakov, Y. V. Bebikhov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, Physical Review E 109, 014215 (2024).
12. G. Chechin and D. Ryabov, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 120, 107176 (2023).
13. D. S. Ryabov, G. Chechin, E. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. Korznikova, and S. V. Dmitriev, Nonlinear Dynamics 111, 8135 (2023).
14. E. A. Korznikova, S. A. Shcherbinin, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. G. Ekomasov, E. Barani, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, physica status solidi (b) 256, 1800061 (2019).
15. S. A. Shcherbinin, K. A. Krylova, G. M. Chechin, E. G. Soboleva, and S. V. Dmitriev, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 104, 106039 (2022).
16. I. Kosarev, S. Shcherbinin, A. Kistanov, R. Babicheva, E. Korznikova, and S. Dmitriev, Computational Materials Science 231, 112597 (2024).
17. I. Kosarev, E. Korznikova, and S. Dmitriev, Procedia Structural Integrity 65, 127 (2024).
18. G. Chechin and D. Ryabov, Letters on Materials 10, 523 (2020).
19. S. Flach and C. R. Willis, Physics reports 295, 181 (1998).
20. S. Flach and A. V. Gorbach, Physics Reports 467, 1 (2008).
21. S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, Y. A. Baimova, and M. G. Velarde, Physics-Uspekhi 59, 446 (2016).
22. P. Zakharov, E. Korznikova, S. Dmitriev, E. Ekomasov, and K. Zhou, Surface Science 679, 1 (2019).
23. R. Murzaev, A. Kistanov, V. Dubinko, D. Terentyev, and S. Dmitriev, Computational Materials Science 98, 88 (2015).
24. G. Bezuglova, G. Chechin, and P. Goncharov, Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 84, 036606 (2011).

Информация об авторах

И. В. Косарев – аспирант и младший научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН.

М. В. Хазимуллин – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН.

С.В. Дмитриев – доктор физико-математических наук, зав. лабораторией Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН.

References

1. M. E. Tuckerman and G. J. Martyna, “Understanding modern molecular dynamics: Techniques and applications,” (2000).
2. R. Khan, Journal of Materials Science and Chemical Engineering 11, 1 (2023).
3. K. Choudhary, F. Y. P. Congo, T. Liang, C. Becker, R. G. Hennig, and F. Tavazza, Scientific data 4, 1 (2017).
4. A. Cherednichenko, P. Zakharov, M. Starostenkov, A. Eremin, and G. Dong, Technical Physics Letters 48, 245 (2022).
5. P. Friederich, F. Hase, J. Proppe, and A. Aspuru-Guzik, Nature Materials 20, 750 (2021).
6. V. Eyert, J. Wormald, W. A. Curtin, and E. Wimmer, Journal of Materials Research 38, 5079 (2023).
7. N. Mola, H. Weishaupt, V. Krasontovitsch, E. Hodneland, and S. Leh, Scientific Reports 15, 27700 (2025).
8. R. Wang, X. Ma, L. Zhang, H. Wang, D. J. Srolovitz, T. Wen, and Z. Wu, Phys. Rev. Mater. 6, 113603 (2022).
9. G. Chechin and V. Sakhnenko, Physica D: Nonlinear Phenomena 117, 43 (1998).
10. G. Chechin, D. Ryabov, and S. Shcherbinin, Physical Review E 92, 012907 (2015).
11. S. Shcherbinin, A. Kazakov, Y. V. Bebikhov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, Physical Review E 109, 014215 (2024).
12. G. Chechin and D. Ryabov, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 120, 107176 (2023).
13. D. S. Ryabov, G. Chechin, E. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. Korznikova, and S. V. Dmitriev, Nonlinear Dynamics 111, 8135 (2023).
14. E. A. Korznikova, S. A. Shcherbinin, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. G. Ekomasov, E. Barani, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, physica status solidi (b) 256, 1800061 (2019).
15. S. A. Shcherbinin, K. A. Krylova, G. M. Chechin, E. G. Soboleva, and S. V. Dmitriev, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation 104, 106039 (2022).
16. I. Kosarev, S. Shcherbinin, A. Kistanov, R. Babicheva, E. Korznikova, and S. Dmitriev, Computational Materials Science 231, 112597 (2024).
17. I. Kosarev, E. Korznikova, and S. Dmitriev, Procedia Structural Integrity 65, 127 (2024).
18. G. Chechin and D. Ryabov, Letters on Materials 10, 523 (2020).
19. S. Flach and C. R. Willis, Physics reports 295, 181 (1998).
20. S. Flach and A. V. Gorbach, Physics Reports 467, 1 (2008).
21. S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, Y. A. Baimova, and M. G. Velarde, Physics-Uspekhi 59, 446 (2016).
22. P. Zakharov, E. Korznikova, S. Dmitriev, E. Ekomasov, and K. Zhou, Surface Science 679, 1 (2019).
23. R. Murzaev, A. Kistanov, V. Dubinko, D. Terentyev, and S. Dmitriev, Computational Materials Science 98, 88 (2015).
24. G. Bezuglova, G. Chechin, and P. Goncharov, Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 84, 036606 (2011).

25. R. I. Babicheva, A. S. Semenov, E. G. Soboleva, A. A. Kudreyko, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, *Physical Review E* 103, 052202 (2021).
26. D. S. Ryabov, I. V. Kosarev, D. Xiong, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, *Computers, Materials & Continua* 82 (2025).
27. K. Krylova, I. Lobzenko, A. Semenov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, *Computational Materials Science* 180, 109695 (2020).
28. D. Abdullina, I. Kosarev, R. Evarestov, A. Kudreyko, and S. Dmitriev, *Chaos, Solitons & Fractals* 199, 116724 (2025).
29. J. Behler and M. Parrinello, *Physical review letters* 98, 146401 (2007).
30. T. Hofmann, B. Schölkopf, and A. J. Smola, (2008).
31. A. P. Bartók, M. C. Payne, R. Kondor, and G. Csányi, *Physical review letters* 104, 136403 (2010).
32. N. Matloff, *Statistical regression and classification: from linear models to machine learning* (Chapman and Hall/CRC, 2017).
33. E. V. Podryabinkin and A. V. Shapeev, *Computational Materials Science* 140, 171 (2017). 15
34. A. A. Kistanov, I. V. Kosarev, S. A. Shcherbinin, A. V. Shapeev, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, *Materials Today Communications* 42, 111437 (2025).
35. I. S. Novikov, K. Gubaev, E. V. Podryabinkin, and A. V. Shapeev, *Machine Learning: Science and Technology* 2, 025002 (2020).
36. E. Podryabinkin, K. Garifullin, A. Shapeev, and I. Novikov, *The Journal of Chemical Physics* 159 (2023).
37. X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L. Martens, T.F. Kelly, *Acta Mater.* 49 (19) (2001) 4005–4015.
38. P.A.T. Olsson, *Comput. Mater. Sci.* 47 (1) (2009) 135–145.
39. D.R. Mason, D. Nguyen-Manh, C.S. Beca, J. Phys.: Condens. Matter 29 (50) (2017) 505501.
40. P. Hiremath, S. Melin, E. Bitzek, P.A.T. Olsson, *Comput. Mater. Sci.* 207 (2022) 111283.
41. G.J. Ackland, X. Huang, K.M. Rabe, *Phys. Rev. B* 68 (21) (2003) 214104.
42. B.-J. Lee, M.I. Baskes, H. Kim, Y.K. Cho, *Phys. Rev. B* 64 (18) (2001) 184102.
43. H. Park, M.R. Fellinger, T.J. Lenosky, W.W. Tipton, D.R. Trinkle, S.P. Rudin, C. Woodward, J.W. Wilkins, R.G. Hennig, *Phys. Rev. B* 85 (21) (2012) 214121.
44. https://openkim.org/id/MEAM_LAMMPS_Lenosky_2017_W_MO_999198119251_001.
45. J. Byggmästar, K. Nordlund, F. Djurabekova, *Phys. Rev. Mater.* 4 (2020) 093802.

Information about the authors

I. V. Kosarev is a PhD student and junior researcher at the Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center, Russian Academy of Sciences.

M. V. Khazimullin is a candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at the Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center, Russian Academy of Sciences.

S. V. Dmitriev is a Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of Lab. at the Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center, Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 15.10.2025; одобрена после рецензирования 24.11.2025; принята к публикации 01.12.2025.

The article was received by the editorial board on 15 Oct. 2025; approved after reviewing 24 Nov. 2025; accepted for publication 01 Dec. 2025.