

УДК 621.315.592

## Использование машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия для изучения свойств кристаллических структур

© 2020 г. О. В. Уварова<sup>1,2,§</sup>, С. И. Уваров<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»  
Российской академии наук,  
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

<sup>2</sup> *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),  
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

**Аннотация.** В процессе моделирования многослойных полупроводниковых наноструктур существенную роль играет быстрое получение точных значений характеристик рассматриваемой структуры. Одной из таких характеристик является значение энергии взаимодействия атомов внутри структуры. Значение энергии важно для получения и других величин, таких как объемный модуль упругости структуры, модуль сдвига и др. В работе рассматриваются способ получения энергии взаимодействия двух атомов, основанный на методах машинного обучения. Модель, построенная на основе машиннообучаемого потенциала GAP (Gaussian Approximation Potential), обучается на заранее подготовленной выборке и позволяет предсказать значения энергии пар атомов для тестовых данных. В качестве признаков использовались значения координат взаимодействующих атомов, расстояние между атомами, значение постоянной решетки структуры, указание на тип взаимодействующих атомов, а также значение, описывающее окружение атомов. Вычислительный эксперимент проводился с участием однокомпонентных соединений, таких как Si, Ge и C. Оценивались скорость получения энергии взаимодействующих атомов, а также точность полученного значения. Характеристики скорости и точности сравнивались со значениями, полученными с помощью многочастичного потенциала межатомного взаимодействия — потенциала Терсоффа.

**Ключевые слова:** кристаллические структуры, потенциальная энергия структуры, потенциал Терсоффа, машиннообучаемый потенциал, Gaussian Approximation Potential, Gaussian Process Regression, машинное обучение

### Введение

Моделирование свойств структур и процессов, происходящих в структурах, является важным направлением современных научных исследований. В настоящее время активно изучаются многослойные полупроводниковые материалы, с помощью которых создаются приборы для нанoeлектроники — транзисторы, светодиоды, полупроводниковые лазеры и др.

Для изучения механизмов возникновения дефектов, появлении вакансий, дивакансий и др. активно применяется молекулярно-динамический подход. В процессе молекулярно-динамического моделирования важно понимание начального со-

стояния кристаллической структуры. Начальное состояние определяется с помощью квантово-механических расчетов, однако моделирование систем, состоящих из более чем 1000 атомов с помощью квантово-механического моделирования является вычислительно затратным. Возникает необходимость использования методов, позволяющих без существенной потери точности получать значения характеристик структур с большей вычислительной эффективностью.

Цель работы — сравнение двух методов получения энергии взаимодействия атомов внутри структуры: с помощью многочастичного потенциала межатомного взаимодействия и с помощью потенциала, основанного на методе машинного обучения.

### Постановка задачи и метод решения

Одной из важнейших характеристик структуры является значение ее потенциальной энергии  $E$ . Она рассчитывается как совокупность энергий взаи-

Уварова Ольга Владимировна<sup>1,2,§</sup> — младший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0001-6260-9696>, e-mail: olga25v@gmail.com; Уваров Сергей Игоревич<sup>1</sup> — младший научный сотрудник, <https://orcid.org/0000-0002-1023-5212>, e-mail: seruv25@gmail.com

§ Автор для переписки

модействия  $V_{ij}$  пар атомов структуры и при расчете требует прохождения по всем атомам системы:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij}. \quad (1)$$

Расчет энергии — ресурсоемкая, но необходимая процедура, использующаяся в том числе для получения значений таких величин, как объемный модуль упругости (2), модуль сдвига (3) и др.

$$B = -V \frac{dP}{dV} = \frac{1}{\Omega} \frac{d^2 E}{dV^2}, \quad (2)$$

где  $P$  — напряжение;  $\Omega$  — объем, приходящийся на один атом ячейки.

$$C' = \frac{1}{4\Omega} \frac{d^2 E}{d\epsilon^2}, \quad (3)$$

где  $\epsilon$  определяет сдвиговую деформацию системы.

Для получения энергии структуры атомов возможно использование многочастичных потенциалов. Так, потенциал Терсоффа подходит для описания структур с ковалентным типом связи и позволяет рассчитывать энергию взаимодействия ( $V_{ij}$ ) двух атомов  $i$  и  $j$  в присутствии третьего атома  $k$  [1]:

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) \left[ f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij}) \right],$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R - R_{\text{cut}} \\ \frac{1}{2} \left[ 1 + \cos \left[ \frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{\text{cut}}} \right] \right], & R - R_{\text{cut}} < r_{ij} < R + R_{\text{cut}} \\ 0, & r_{ij} > R + R_{\text{cut}} \end{cases},$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp \left[ -\kappa_{ij} (r_{ij} - R_e) \right],$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp \left[ -\mu_{ij} (r_{ij} - R_e) \right],$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left( 1 + \gamma_i^{ni} \zeta_{ij}^{ni} \right)^{-\frac{ni}{2}},$$

$$\zeta_{ij}^{ni} = \sum_{k \neq ij} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{jik}),$$

$$\omega_{ik} = \exp \left[ \lambda^3 (r_{ij} - r_{ik})^3 \right],$$

$$g(\theta_{jik}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{\left[ d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{jik})^2 \right]},$$

$$A_i = \frac{D_{ei}}{S_i - 1}, \quad B_i = \frac{S_i D_{ei}}{S_i - 1},$$

$$\kappa_i = \beta_i \sqrt{2S_i}, \quad \mu_i = \beta_i \sqrt{\frac{2}{S_i}},$$

где  $c, d, n, h, D_e, S, \beta, R_e, \lambda, \gamma, \chi$  — параметры потенциала Терсоффа, индивидуальные для каждого соединения.

Существенной сложностью при использовании такого подхода является необходимость подбора набора параметров для каждого соединения. Значение параметра зависит от типа взаимодействующих атомов и подбирается для пар и троек атомов. Так, для однокомпонентного соединения, где взаимодействуют атомы только одного типа, насчитывается 11 параметров потенциала Терсоффа. В случае же с двухкомпонентными соединениями, количество различных параметров возрастает до 33. Скорость подбора параметров для системы, состоящей из более 1000 атомов оказывается низкой. Сложность расчета значения энергии системы с учетом известных параметров потенциала оценивается как  $O(n^3)$ , где  $n$  — количество атомов в системе.

Алгоритм подбора параметров потенциала Терсоффа, наилучшим образом описывающих моделирование физических процессов в структурах, представлен в работе [2].

В настоящее время активное развитие получили машиннообучаемые потенциалы — потенциалы, основанные на методах машинного обучения. Модели, которые лежат в основе таких потенциалов, после обучения на квантово-механических расчетах позволяют предсказывать значения с достаточной точностью и вычислительной эффективностью.

Одними из примеров машиннообучаемых потенциалов являются потенциалы гауссового приближения GAP (*Gaussian Approximation Potentials*). В качестве метода обучения в GAP используется регрессия на основе гауссовских процессов (GPR, *Gaussian Process Regression*) [3].

Пусть  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^{n \times D}$  — признаковое описание выборки из  $n$  объектов, а  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$  — соответствующие им известные значения, где  $y$  — зашумленные значения некоторого скрытого случайного процесса  $f: \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ , являющегося гауссовским процессом.

$$f \sim GP[\mu(\cdot, \cdot), k(\cdot, \cdot)],$$

$k(\cdot, \cdot)$  — ковариационная функция — ядро;  $\mu(\cdot, \cdot) = 0$  — математическое ожидание.

Для любого конечного набора переменных  $F = f(X)$ ,

$$F = [f(x_1), \dots, f(x_n)] \sim \mathcal{N}[\mu(\cdot, \cdot), k(\cdot, \cdot)].$$

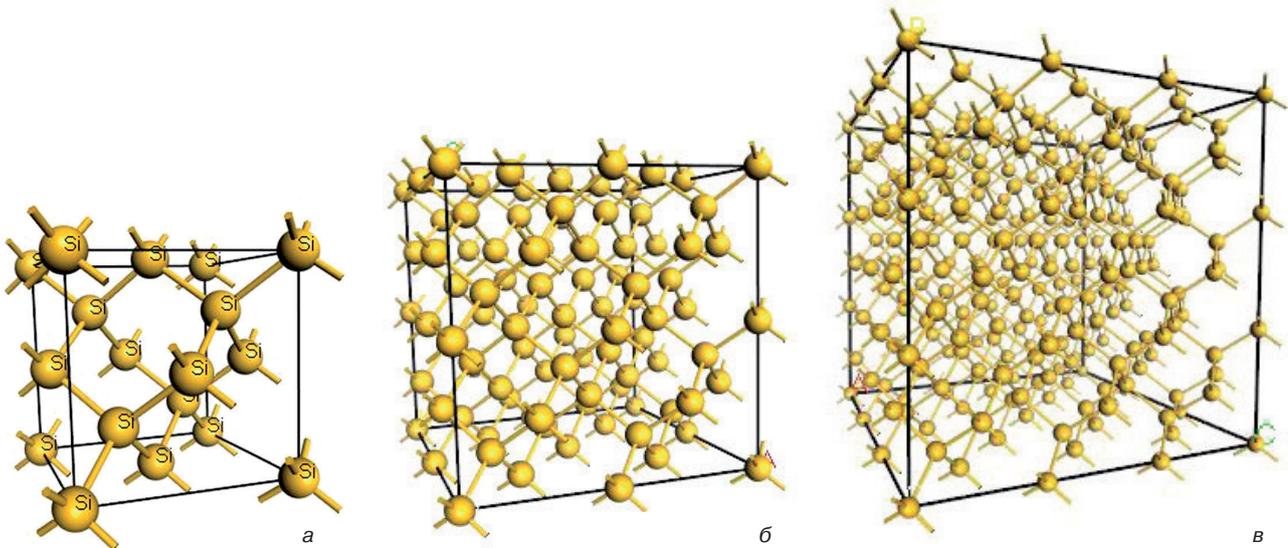


Рис. 1. Операций симметрии базисных атомов: а — элементарная ячейка из 18 атомов Si; б — размноженная ячейка из 64 атомов Si; в — размноженная ячейка из 280 атомов Si

Fig. 1. Operations of symmetry of basic atoms: (a) unit cell of 18 Si atoms; (b) multiplied cell of 64 Si atoms; (v) multiplied cell of 280 Si atoms

В качестве ядра используется радиально-базисная функция.

$$k(x, y, r, \sigma_{\text{noise}}, \sigma_{\text{sf}}) = \sigma_{\text{sf}}^2 \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{r^2}\right) + \sigma_{\text{noise}}^2.$$

**Вычислительный эксперимент**

Было проведено исследование на следующих однокомпонентных структурах: Si, Ge, C. Для каждого соединения были известны его базисные атомы, занимающие позиции Уайкова. С помощью операций симметрии базисные атомы размножались до элементарной ячейки, которая, в свою очередь, с помощью параллельного переноса по всем направлениям размножалась до структур, состоящих из более 250 атомов (рис. 1).

Рассматривались следующие конфигурации атомов в полученных структурах: отклонения ато-

мов от положения равновесия по всем трем направлениям, возникновение дефектов: вакансии и дивакансии в различных позициях базисных атомов.

Для рассмотренных конфигураций атомов рассчитывались значения энергии с помощью пакета *Quantum Espresso (QE)*. Рассчитывались значения энергии взаимодействия таких пар взаимодействующих атомов *i* и *j* в рамках каждой системы, где атомы *i* не принадлежат тождественным элементам симметрии и принимают значение неэквивалентных позиций базисных атомов, а атомы *j* находятся в пределах радиуса отсечения  $R_{\text{cut}}$ . Для всех рассматриваемых соединений и структур атомов было рассчитано порядка 13000 значений энергий взаимодействующих пар атомов.

Для использования методов машинного обучения все категориальные признаки были переведены в числовые, с помощью однострочного кодирования был зафиксирован тип взаимодействующих атомов.



Рис. 2. Кросс-валидация  
Fig. 2. Cross-validation

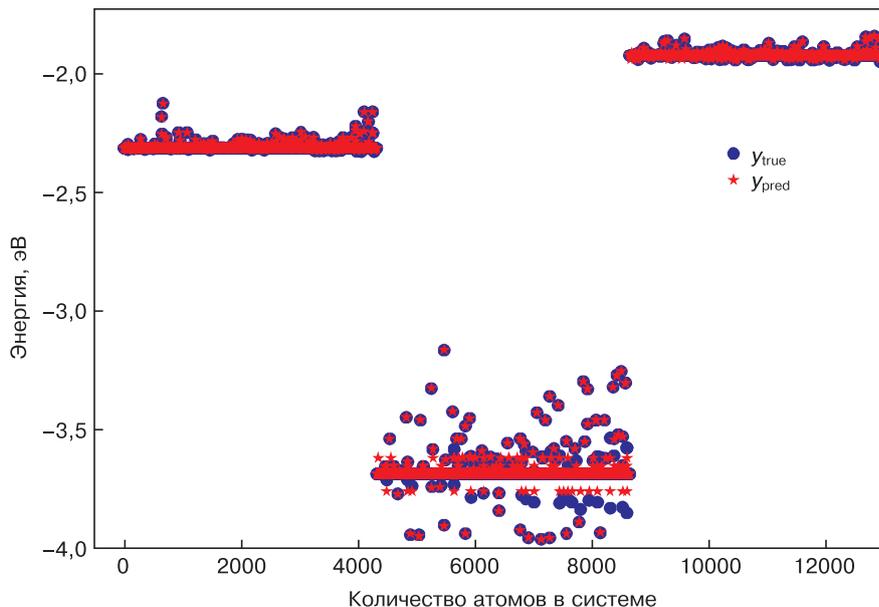


Рис. 3. Предсказанные значения энергии ( $y_{pred}$ ) и верные значения энергии ( $y_{true}$ ) взаимодействия пар атомов для структур Si, Ge и C

Fig. 3. Predicted values of energy ( $y_{pred}$ ) and correct values of energy ( $y_{true}$ ) of interaction of pairs of atoms for structures of Si, Ge and C

Так как обученный алгоритм может сильно меняться в зависимости от обучающей выборки, использовалась кросс-валидация (рис. 2) — разбиение данных на несколько одинаковых частей для поочередного использования каждой части в качестве тестовой выборки, а оставшейся части — в качестве обучающей выборки.

Для оценки качества работы алгоритма использовались метрики средней квадратичной ошибки

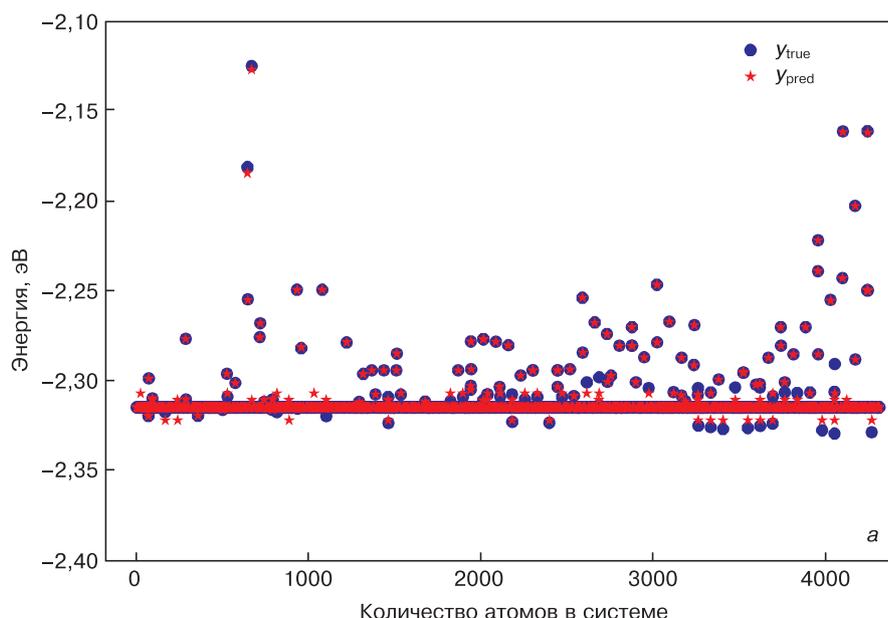
$$MSE = \frac{1}{n} \sum (y_{true} - y_{pred})^2,$$

где  $y_{true}$  — значение энергии, рассчитанное с помощью QE;  $y_{pred}$  — значение энергии, предсказанное с помощью машиннообученной модели.

При расчете значения энергии взаимодействия атомов с помощью потенциала Терсоффа с подобранными параметрами было получено значение  $MSE = 0,00001$  [2].

Для исследования применимости использования машиннообучаемых потенциалов в изучении свойств структур проводился эксперимент с использованием машиннообучаемого потенциала GAP. Для признакового описания значений энергии взаимодействия атомов использовались:

- координаты взаимодействующих атомов;
- расстояние между взаимодействующими атомами;
- постоянная решетка системы, в рамках которой рассматривается взаимодействие двух атомов;



Продолжение рис. 4 см. на следующей странице

Начало рис. 4 см. на предыдущей странице

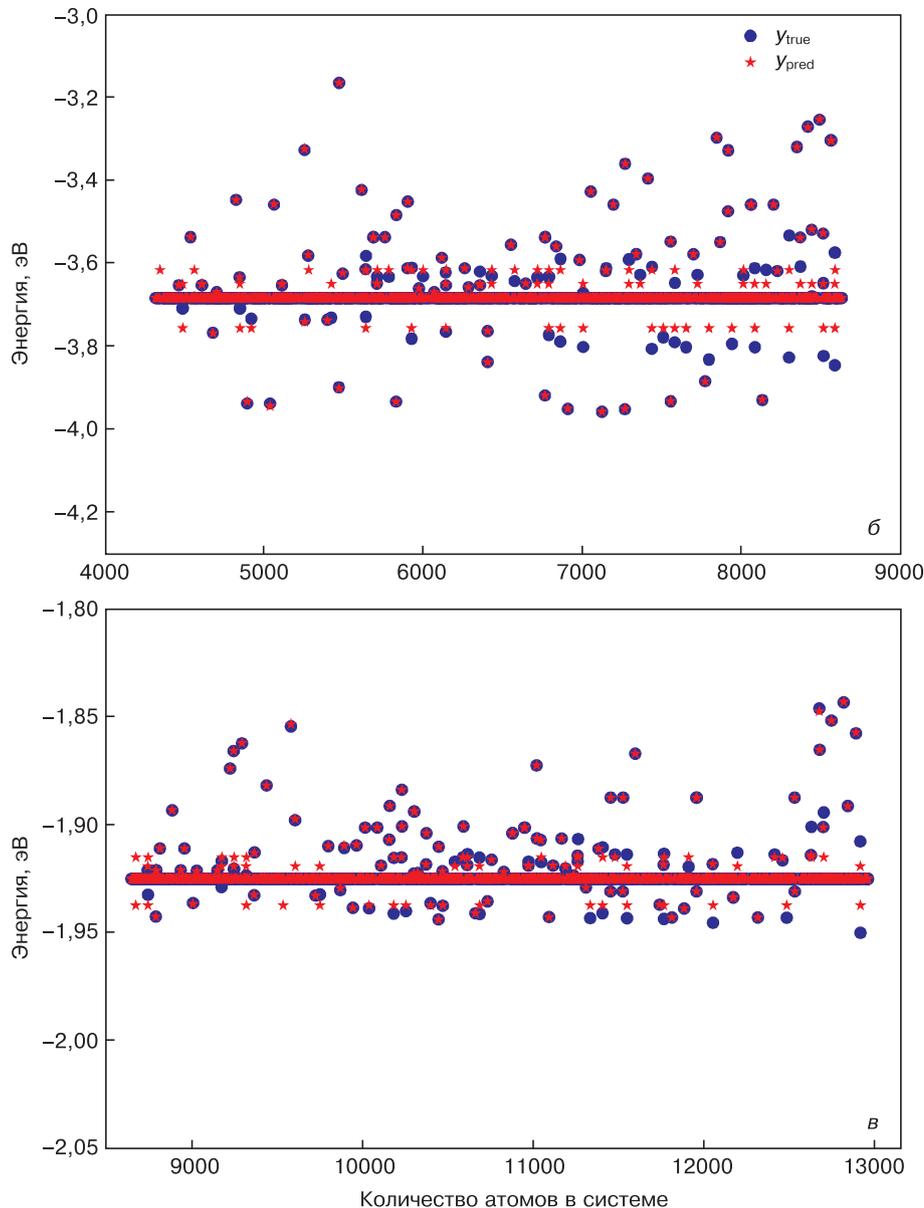


Рис. 4. Предсказанные значения энергии ( $y_{pred}$ ) и верные значения энергии ( $y_{true}$ ) взаимодействия пар атомов структур: а — Si; б — C; в — Ge

Fig. 4. Predicted values of energy ( $y_{pred}$ ) and correct values of energy ( $y_{true}$ ) of interaction of pairs of atoms of structures: (a) Si; (б) C; (в) Ge

- указание на тип взаимодействующих атомов;
- значение  $X_E$ , описывающее окружение атома [4]:

$$X_E = \sum_i \sum_{j \neq i} \exp \left[ - \left( \frac{r_{ij}}{R_{cut}} \right)^p \right],$$

где  $r_{ij}$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ;  $R_{cut}$  — расстояние отсечения, параметр, определяемый для каждой структуры исходя из ее геометрических характеристик;  $p$  — параметр, определяемый для каждой структуры.

Была обучена модель, позволяющая предсказывать значения энергии  $E$  взаимодействия пар

атомов для структур Si, Ge и C. В результате оценки качества данной модели было получено значение  $MSE = 0,0000283$ .

На рис. 3 представлено распределение предсказанных ( $y_{pred}$ ) и верных ( $y_{true}$ ) значений энергии, полученных с помощью QE, для взаимодействующих пар атомов структур Si, Ge и C. На рис. 4 представлены  $y_{pred}$  и  $y_{true}$  для структур каждого из рассматриваемых элементов.

При этом скорость расчета энергии взаимодействия атомов с помощью потенциала Терсоффа проигрывает скорости получения значения энергии с помощью машиннообученной модели, как показано на рис. 5.

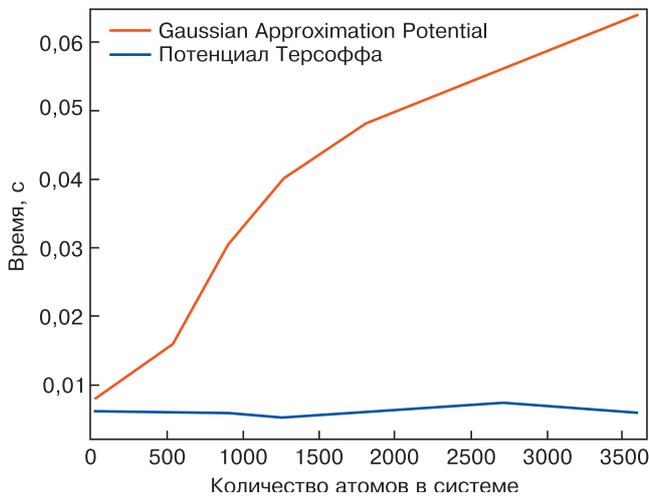


Рис. 5. Зависимость скорости расчета энергии от количества атомов в системе

Fig. 5. Dependence of the rate of energy calculation on the number of atoms in the system

### Заключение

Таким образом, благодаря использованию методов машинного обучения и, в частности, машиннообучаемых потенциалов, возможно существенное ускорение работы алгоритмов получения значения свойств материалов, например, энергии взаимодействия атомов в структуре атомов. Демонстрируемая же точность при этом ниже, чем при расчете значений с помощью многочастичного потенциала. Это говорит о необходимости поиска более прогрессивных алгоритмов машинного обучения и наиболее подходящих машиннообучаемых потенциалов для дальнейшего улучшения точности модели.

### Библиографический список

1. Powell D. Elasticity, lattice dynamics and parameterization techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors: dis. University of Sheffield, 2006. 259 p. URL: <https://etheses.whiterose.ac.uk/15100/1/434519.pdf>
2. Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach // Modern Electronic Materials. 2015. V. 1, N 3. P. 82—87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001

3. Bartók-Pirtay A. The Gaussian Approximation Potential: an interatomic potential derived from first principles quantum mechanics. Springer Science & Business Media, 2010. 107 p. DOI: 10.1007/978-3-642-14067-9

4. Круглов И. А. Поиск новых соединений, изучение их стабильности и свойств с использованием современных методов компьютерного дизайна материалов: Дисс. канд. физ.-мат. наук. М.: Ин-т физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 2018. 112 с.

5. Gramacy R. B. Surrogates: Gaussian process modeling, design, and optimization for the applied sciences. Chapman and Hall/CRC, 2020. 559 p.

6. Vorontsov K. Mathematical Learning Methods on Precedents. Course of Lectures, 2006.

7. Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.-R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108, N 5. P. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301

8. Faber F., Lindmaa A., von Lilienfeld O. A., Armiento R. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies // Int. J. Quantum Chem. 2015. V. 115, N 16. P. 1094—1101. DOI: 10.1002/qua.24917

9. Bartók A. P., Csányi G. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction // Int. J. Quantum Chem. 2015. V. 115, N 16. P. 1051—1057. DOI: 10.1002/qua.24927

10. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Uvarov S. I., Uvarova O. V. Multiscale Modeling of Clusters of Point Defects in Semiconductor Structures // CEUR Workshop Proceedings, 2019. P. 43—51. <http://ceur-ws.org/Vol-2426/paper7.pdf>

11. Deringer V. L., Csányi G. Machine learning based interatomic potential for amorphous carbon // Phys. Rev. B. 2017. V. 95, N 9. P. 094203. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.094203

12. Novikov I. S., Shapeev A. V. Improving accuracy of interatomic potentials: more physics or more data? A case study of silica // Materials Today Commun. 2019. V. 18. P. 74—80. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2018.11.008

13. Wu S. Q., Ji M., Wang C. Z., Nguyen M. C., Zhao X., Umamoto K., Wentzcovitch R. M., Ho K. M. An adaptive genetic algorithm for crystal structure prediction // J. Phys.: Condens. Matter. 2014. V. 26, N 3. P. 035402. DOI: 10.1088/0953-8984/26/3/035402

14. Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.-R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108, N 5. P. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301

15. Coifman R. R., Kevrekidis I. G., Lafon S., Maggioni M., Nadler B. Diffusion maps, reduction coordinates, and low dimensional representation of stochastic systems // Multiscale Model. Simul. 2008. V. 7, N 2. P. 842—864. DOI: 10.1137/070696325

16. Behler J., Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98, N 14. P. 146401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.146401

17. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction. Springer Science & Business Media, 2009. 767 p. DOI: 10.1007/b94608

*Работа выполнена при поддержке РФФИ проект № 19-29-03051 мк.*

*При проведении расчетов использовался вычислительный кластер ФИЦ ИУ РАН.*

*Статья поступила в редакцию 14 декабря 2020 г.*

*Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 304–310.  
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-304-310

## Machine–learning based interatomic potential for studying of crystal structures properties

O. V. Uvarova<sup>1,2,§</sup>, S. I. Uvarov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Federal Research Centre “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences,  
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

<sup>2</sup> *Moscow Aviation Institute (National Research University),  
4 Volokolamskoe Shosse, 4, Moscow 125993, Russia*

**Abstract.** In the process of modeling multilayer semiconductor nanostructures, it is important to quickly obtain accurate values the characteristics of the structure under consideration. One of these characteristics is the value of the interaction energy of atoms within the structure. The energy value is also important for obtaining other quantities, such as bulk modulus of the structure, shear modulus etc. The paper considers a machine learning based method for obtaining the interaction energy of two atoms. A model built on the basis of the Gaussian Approximation Potential (GAP) is trained on a previously prepared sample and allows predicting the energy values of atom pairs for test data. The values of the coordinates of the interacting atoms, the distance between the atoms, the value of the lattice constant of the structure, an indication of the type of interacting atoms, and also the value describing the environment of the atoms were used as features. The coordinates of the atoms, the distance between the atoms, the lattice constant of the structure, an indication of the type of interacting atoms, the value describing the environment of the atoms were used as features. The computational experiment was carried out with structures of Si, Ge and C. There were estimated the rate of obtaining the energy of interacting atoms and the accuracy of the obtained value. The characteristics of speed and accuracy were compared with the characteristics that were achieved using the many–particle interatomic potential — the Tersoff potential.

**Keywords:** crystal structures, potential energy of structure, Tersoff potential, machine learning potential, Gaussian Approximation Potential, Gaussian Process Regression, machine learning

### References

- Powell D. *Elasticity, lattice dynamics and parameterization techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors*: Dis. (PhD). University of Sheffield, 2006, 259 p. URL: <https://etheses.whiterose.ac.uk/15100/1/434519.pdf>
- Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach. *Modern Electronic Materials*, 2015, vol. 1, no. 3, pp. 82–87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001
- Bartók–Pirtay A. *The Gaussian Approximation Potential: an interatomic potential derived from first principles quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, 2010. 107 p. DOI: 10.1007/978-3-642-14067-9
- Kruglov I. A. *Search for new compounds, study of their stability and properties using modern methods of computer design of materials*: Diss. Cand. Sci. (Phys.–Math.). Moscow: Institute of High Pressure Physics. L.F. Vereshchagin RAS, 2018, 112 p. (In Russ.)
- Gramacy R. B. *Surrogates: Gaussian process modeling, design, and optimization for the applied sciences*. Chapman and Hall/CRC, 2020, 559 p.
- Vorontsov K. *Mathematical Learning Methods on Precedents*. Course of Lectures, 2006.
- Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.–R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, vol. 108, no. 5, p. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301
- Faber F., Lindmaa A., von Lilienfeld O. A., Armiento R. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies. *Int. J. Quantum Chem.*, 2015, vol. 115, no. 16, pp. 1094–1101. DOI: 10.1002/qua.24917
- Bartók A. P., Csányi G. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction. *Int. J. Quantum Chem.*, 2015, vol. 115, no. 16, pp. 1051–1057. DOI: 10.1002/qua.24927
- Abgaryan K. K., Mutigullin I. V., Uvarov S. I., Uvarova O. V. Multiscale modeling of clusters of point defects in semiconductor structures. In: *CEUR Workshop Proceedings*, 2019, pp. 43–51. URL: <http://ceur-ws.org/Vol-2426/paper7.pdf>
- Deringer V. L., Csányi G. Machine learning based interatomic potential for amorphous carbon. *Phys. Rev. B*, 2017, vol. 95, no. 9, p. 094203. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.094203
- Novikov I. S., Shapeev A. V. Improving accuracy of interatomic potentials: more physics or more data? A case study of silica. *Materials Today Commun.*, 2019, vol. 18, pp. 74–80. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2018.11.008
- Wu S. Q., Ji M., Wang C. Z., Nguyen M. C., Zhao X., Umamoto K., Wentzovitch R. M., Ho K. M. An adaptive genetic algorithm for crystal structure prediction. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2014, vol. 26, no. 3, p. 035402. DOI: 10.1088/0953-8984/26/3/035402
- Rupp M., Tkatchenko A., Müller K.–R., von Lilienfeld O. A. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, vol. 108, no. 5, p. 058301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.058301
- Coifman R. R., Kevrekidis I. G., Lafon S., Maggioni M., Nadler B. Diffusion maps, reduction coordinates, and low dimensional representation of stochastic systems. *Multiscale Model. Simul.*, 2008, vol. 7, no. 2, pp. 842–864. DOI: 10.1137/070696325
- Behler J., Parrinello M. Generalized neural–network representation of high–dimensional potential–energy surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, vol. 98, no. 14, p. 146401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.146401
- Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. *The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction*. Springer Science & Business Media, 2009, 767 p. DOI: 10.1007/b94608

### Acknowledgments

*This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project No. 19–29–03051 MK.*

*The calculations were performed using the computing cluster of the Federal Research Center of the Institute of Management of the Russian Academy of Sciences.*

### Information about authors:

**Olga V. Uvarova**<sup>1,2,§</sup>: Junior Researcher (olga25v@gmail.com); <https://orcid.org/0000-0001-6260-9696>; **Sergey I. Uvarov**<sup>1</sup>: Junior Researcher (seruv25@gmail.com); <https://orcid.org/0000-0002-1023-5212>

§ Corresponding author

Received December 14, 2020