



人工智能和数据驱动的计算模拟

李贺¹, 徐勇^{1*}, 段文晖¹, 肖睿娟^{2*}, 翁红明^{2*}

1. 清华大学物理系, 北京 100084;

2. 中国科学院物理研究所, 北京 100190

*联系人, 徐勇, E-mail: yongxu@mail.tsinghua.edu.cn; 肖睿娟, E-mail: rjxiao@iphy.ac.cn; 翁红明, E-mail: hmweng@iphy.ac.cn

收稿日期: 2024-01-27; 接受日期: 2024-02-29; 网络出版日期: 2024-03-21

摘要 “大数据+人工智能”代表着一种崭新的研究范式, 对未来科学研究将产生深远影响. 在计算物理领域, 人工智能和数据驱动正促成新方法论的形成, 也由此衍生出新的重要科学问题. 本文将探讨人工智能和数据驱动的计算模拟这一新兴研究领域, 综述相关研究进展, 并对未来的发展进行展望.

关键词 计算物理, 人工智能, 数据驱动

PACS: 31.15.Ar, 93.85.Bc, 82.20.Wt

1 发展现状

近年来, 以大数据为基础的人工智能技术迅速发展^[1,2], 已经与各行各业深度融合, 正深刻地改变着人类的思维与行为方式. 在科学研究领域, 人们相信, “大数据+人工智能”代表着一种全新的研究范式. 在计算物理领域, 人工智能和数据驱动也正在促成新方法论的形成^[3,4]. 一方面, 大量计算流程、数据处理和分析过程正在被高通量计算和机器学习模型所加速^[5-8]; 另一方面, 新兴大数据模型的建立, 提供了探索复杂因素之间关联性的新途径, 开辟了基于智能化设计与验证的科学探索的新方向^[9-13]. 可以预期, 人工智能与计算物理形成的学科交叉, 必将提升计算物理在物理学研究中所占的比例, 使得通过数据驱动的研究范式发现新的物理现象和规律成为可能.

计算物理包含多个学科分支, 所涉及的物质科学

数据面临来源多、分散广、类型杂、采集难等问题, 如何获取面向下一代人工智能技术的物质科学数据并建立数据库的设计原则, 如何实现应用于多学科、跨领域、多尺度数据融合技术的自主型机器学习, 如何构建应用于物质科学研究的预训练大模型, 如何实现人工智能驱动的物质科学研究范式转变是这一领域急需发展的科学技术. 2023年12月31日国家数据局等部门印发的《“数据要素×”三年行动计划(2024–2026年)》, 提出“促进重大科技基础设施”“依托国家科学数据中心等平台强化高质量科学数据资源建设和场景应用”“以科学数据支撑技术创新进行新材料创制”“建设高质量基础科学数据集”“加速科学研究范式变革”等一系列科技创新规划, 体现了数据要素在未来物质科学研究中的重要地位.

数据驱动的物质科学研究面临一个挑战, 即已有的材料数据相当有限, 数据量的不足限制了基于大数

引用格式: 李贺, 徐勇, 段文晖, 等. 人工智能和数据驱动的计算模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2024, 54: 247109

Li H, Xu Y, Duan W H, et al. Artificial intelligence and data-driven computational simulation (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2024, 54: 247109, doi: [10.1360/SSPMA-2024-0030](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0030)

据的材料设计. 考虑到材料数据库中包含的材料构型数量远远小于可能存在的所有材料构型数量, 可以通过计算物理方法预测更多材料构型的性质, 构建更大的材料数据库, 从而推动基于大数据的材料发现. 然而, 高通量进行常规计算物理方法将消耗大量计算资源, 这为计算物理的方法发展研究提出了较大的挑战. 在这一背景下, 借助人工智能技术发展准确且高效的计算物理方法也已成为一个关键的研究方向^[14-16].

2 数据驱动与AI赋能

人工智能的三大要素是算力、算法和数据. 其中, 数据更为基础, 是基本的生产要素, 数据质量决定了人工智能表现的优劣. 在计算物理领域, 构建面向AI可使用的高质量数据资源, 是一个急需解决的问题. 凝聚态物质科学的数据汇聚难点在于: 数据来源多样导致的汇聚难; 数据不规范、不统一导致的筛选难; 数据分布零散导致的查找、获取和利用难; 现有数据库的分散孤立导致的融合、共享难. 因此围绕人工智能和数据驱动的计算模拟, 需要完善四大基本任务: 建立高效稳定的数据汇聚技术平台、建设高质量的数据资源库、开发基于AI的数据分析应用方法、建成开放共享的数据社区^[17].

(1) 数据汇聚

凝聚态物质研究产生的计算数据、实验数据和理论数据是驱动计算模拟的主要数据来源, 但该领域是“小数据、大科学”的典型代表. 由于没有集中的数据产生源, 仪器设备、科研活动都比较分散, 因此发展自动化、规范化的数据汇聚技术, 是确保数据质量和数量的关键. 例如通过打通实验测量硬件与数据收集软件之间的互联和传递, 利用自动化采集提高效率的同时, 实现数据在个人账户和电子实验记录本之间的自动流转和分发, 实现同一类实验记录的标准化、实验过程的可重复化以及数据格式的统一化. 电子化实验数据采集可大幅提高数据汇聚的效率, 以单晶薄膜生长设备为例, 可在半年内采集22 GB数据, 相对于传统手写记录5年获得0.3 GB的数据量有了数量级的增长, 而且所采集的数据更全面、更准确、更规范, 也能实时反映实验设备的状态, 侦测异常条件变化导致的实验数据异常, 利于物质科学领域数据的统一和积累, 也利于数据质量控制、实验再现和后续的数据再利用等^[18].

(2) 数据资源库

数据汇聚后需构建各个专题数据库, 形成方便应用的数据资源体系. 计算物理关注的物质科学领域所涵盖的研究非常广泛, 数据库资源需贯穿物质科学研究全过程, 包括材料生长制备、结构表征和物性测量的全链条数据, 兼顾计算到实验、微观到宏观等各种条件下的数据. 我国在物质科学领域已有越来越多开放共享的特色数据库, 包含拓扑材料、铁电材料、拓扑声子材料、非线性光学、晶体结构和衍射谱、能源材料、非晶合金材料、材料辐照损伤等学科分支的数据, 涉及计算数据、实验数据和文献数据等^[19]. 上述数据资源每年约有百万次的有效访问, 其中国际访问约占20%, 已经具有一定的国际影响力, 也说明全面而多样性的数据资源库在科研人员的日常工作中已变得越来越重要.

(3) 数据分析应用

基于各类数据资源库, 可以把过去积攒的知识和数据有效地联系在一起, 通过机器学习等新的人工智能手段, 提高识别有效和无效数据的能力, 发现新的物质结构、现象和规律, 实现AI赋能. 通过建立“结构-物性”的构效关系模型, 可以提高对各种材料性能的预测能力, 降低新材料设计的成本和周期; 通过计算和测量数据与模型预测数据的对比, 可以提高发现非常规物理现象的可能; 将模型部署于提供算力的软件平台上, 将有利于数据及软件的共同标准化, 形成领域影响力. 基于数据资源平台, 开发适用于各类数据的去噪、聚类程序^[20]以及适用于各类材料物性的在线分析、AI模型训练等插件, 进行实时、便捷的云计算、云训练、云工作, 实现数据、算力、算法三大要素的集成应用, 将更好地发掘大数据的潜在价值.

(4) 数据融合共享

数据库的融合和集成是AI应用的必要步骤. 通过融合多种物质的计算、实验、文献数据库和知识库, 由此生成可用于推动计算模拟的各类数据资源, 打造该领域的数据库互联、跨库智能检索、人机互动的知识问答和计算任务构建与分发. 以融合了拓扑材料数据库构建的材料知识问答系统TopChat为例, 可以基于数据资源, 实现关于晶体结构描述、拓扑分类等对话问答, 并进行相似材料推荐、知识图谱展示、晶体结构图的文字描述、知识图谱检索等, 初步具备一定的

推理能力, 提供了比通用大语言模型更加准确的信息输出. 因此发展先进的数据融合技术, 发现数据之间的关联, 将为物理规律的发现提供可能, 对计算物理中新模型和新方法的引入带来契机.

3 AI驱动的计算物理方法发展

人工智能驱动的物质科学研究要取得成功, 在很大程度上取决于数据的数量和质量. 至今为止, 国际上已建立了多个著名的材料数据库, 但其中包含的材料数量仍非常有限. 通过采用第一性原理计算方法和高通量计算技术, 可以构建更为庞大的材料数据库. 第一性原理计算是从量子力学基本原理出发, 无需引入经验模型或拟合参数, 通过求解薛定谔方程来预测材料性质. 然而, 对于传统的第一性原理计算方法而言, 大规模高通量计算过于昂贵, 大型材料数据库的构建受限于计算效率, 人工智能技术的发展为解决该困境带来了曙光.

近年来, 计算物理领域正经历研究范式的转变. 新颖的数据科学方法, 以深度学习为代表, 正辅助甚至替代多年来发展的传统算法. 深度学习是一种特殊的机器学习, 主要基于人工神经网络. 最初设计是为了模拟人类大脑的运作规律, 通过连接大量神经元并改变它们之间的连接方式, 实现监督学习、非监督学习等多样化的复杂功能. 深度学习已广泛应用于图像识别、语音识别、自然语言处理等多个领域. 在传统的计算物理中, 需要根据基本的物理原理建模物理方程, 然后进行数值模拟和计算, 通常需要耗费大量的计算资源和时间, 这限制了研究的范畴和数据产生的规模. 相比之下, 深度学习方法通过大量数据训练, 利用深度神经网络学习特征表示建模复杂的函数关系, 自动发现数据中的规律和模式, 从而绕过了复杂的物理方程求解过程, 实现了高效的科学计算. 神经网络与第一性原理计算的交叉融合, 催生了“神经网络第一性原理计算”这一新兴研究领域, 致力于发展人工智能驱动的计算物理方法. 接下来介绍四个相关方向的交叉应用.

(1) 神经网络量子蒙特卡罗

量子蒙特卡罗方法利用变分原理计算多电子体系的基态^[21]. 传统方法采用Slater Jastrow等假设, 表示多体波函数. Carleo和Troyer^[22]将基于神经网络的机器学习融入量子蒙特卡罗, 以研究自旋模型, 引入了一种开

创性的方法. 他们采用神经网络来建模多体波函数, 将能量期望值视为损失函数进行优化, 从而实现高精度的基态预测. 随后, 这种方法从模型体系被扩展到实际材料的研究. 重要的发展包括PauliNet^[23]和FermiNet^[24], 能准确表示实际分子系统的波函数. 这些方法采用反对称神经网络以满足两个电子交换的费米子反对称性要求. 后续, 这些方法又拓展到了周期性固体材料^[25]和多种原子几何结构的场景^[26,27]. 在示例研究中, PauliNet和FermiNet相对于传统方法, 比如耦合簇方法, 展示了更高的准确性, 并有较低的 $O(N^4)$ 渐进复杂度. 神经网络量子蒙特卡罗方法在准确高效处理包含大量电子的系统方面具有研究前景.

(2) 神经网络能量泛函

寻找准确高效的密度泛函, 对于密度泛函理论的发展至关重要. 其中一个重要的方向是无轨道密度泛函理论的发展, 该方法令动能和总能量都直接表达为电荷密度的泛函, 能在不求解本征态问题的情况下计算基态性质, 使得算法具有较低的计算复杂度. 人工智能技术可以用于设计动能密度泛函. 在2012年, 研究者使用核岭回归方法对一维模型进行了研究, 对机器学习动能密度泛函进行了原理性验证^[28]. 后续研究使用神经网络构建动能密度泛函, 在计算现实材料时表现出较高的精度. 另一个有前景的方向是发展机器学习交换关联泛函. 交换相关泛函的确切形式是未知的, 可以通过深度神经网络学习. 例如, DeepMind开发了DM21泛函^[29], 其精度高于杂化泛函, 接近双杂化泛函, 但更为高效.

(3) 神经网络分子动力学

分子动力学是原子尺度材料模拟中最重要的方法之一^[30]. 在分子动力学模拟中, 原子间力场通常是通过经验模型或第一性原理计算获得的. 前者计算成本低, 但误差较大; 后者准确, 但计算成本较高. 人工智能可以帮助我们兼得两者的优势. 其策略是通过第一性原理计算数据训练原子间力场的深度神经网络模型, 能够实现第一性原理力场的精度; 训练好的神经网络力场能快速预测指定原子构型的能量与受力, 得益于神经网络计算代价小, 该计算过程具有传统经验力场的高效率和线性时间标度^[31-33]. 近期的一系列研究使用材料数据库中的大量数据, 训练通用的神经网络力场模型, 有望在计算材料科学中找到广泛的应用^[34-36].

(4) 神经网络电子结构

理解、预测材料物性离不开电子结构计算, 近期出现的基于神经网络的机器学习电子结构工作关注密度泛函理论哈密顿量这一基本物理量, 由此可计算单粒子图像下的任何可观察物理量. 这类方法通过深度神经网络模型, 学习密度泛函理论哈密顿量对原子结构的依赖关系^[37,38], 可通过小尺寸体系的密度泛函理论数据来训练深度神经网络, 再用训练好的神经网络预测大尺寸新结构的密度泛函理论哈密顿量, 从而可以绕过耗时的自洽迭代过程, 以紧束缚方法的计算代价实现第一性原理精度的电子结构计算^[39-41], 有希望突破第一性原理电子结构计算的精度-效率两难困境.

4 算力: 数据与AI算法的强大推手

随着人工智能和数据驱动计算模拟技术的快速发展, 算力已成为推动这些技术进步的关键因素之一. 尤其是在微观尺度的模拟领域, 高性能的计算能力不仅能够加速计算过程, 还能使更加复杂和精细的模型得以实现, 从而提高模拟的精度和可靠性. 在这一背景下, 算力, 尤其是国产算力的发展尤显重要.

通过自主研发的处理器、高效的并行计算架构以及优化的算法实现, 国产算力不仅在提高计算速度和处理大规模数据集方面展现出了巨大的潜力, 也在降低能耗、提升计算效率方面取得了突破. 这对于数据密集型和计算密集型的科学研究, 如神经网络模型训练、大规模的材料计算模拟等, 都提供了强大的支持.

然而, 尽管国产算力在提升计算性能、促进科技进步方面发挥了重要作用, 但面对日益增长的计算需求, 仍面临着一系列挑战. 这包括如何进一步提升处理器的计算能力、如何优化算法以充分利用硬件资源、如何在保证计算效率的同时降低能耗和成本等问题.

总之, 国产算力在人工智能和数据驱动计算模拟领域的应用展现出了巨大的潜力和价值. 通过持续的技术创新和优化, 有望进一步推动这些领域的研究和应用.

5 未来发展

人工智能和数据资源驱动的计算模拟对于物性规律的认识、新材料的发现具有重要的推动潜力. 但目前人工智能的数据驱动模式对计算资源的耗费十分巨大, 在未来的发展中, 计算物理学中的数据研究范式应避免以不计成本的投入计算资源来实现. 通过计算物理领域与大数据领域的交叉, 实现相互的知识应用和技术突破, 更有可能通过数据驱动的计算模拟使得计算物理学科走向智能化、提高其计算效率和对物质的预言能力.

在数据汇聚方面, 除了逐步开发高质量、高效率的数据收集方法外, 由于物质科学所研究的化学空间巨大, 还需要解决现有数据稀疏分布以及不均匀分布的问题. 在数据分析方面, 需要应用先进的数据挖掘和人工智能算法, 基于统计物理理论发展材料构效关系提取、物化性质预测等模型, 发挥大数据解决复杂物理问题的能力, 实现新的物理现象或规律的获取以及新的材料设计方案. 在数据库建设和数据融合方面, 需解决数据的多源性和异质性、基于查询和驱动的学习框架、深度学习挖掘和泛化能力等, 实现本领域数据知识的自然语言输出.

在人工智能驱动的计算物理方法方面, 未来的深度学习计算物理算法需要更恰当地融入和利用物理先验知识. 例如, 利用对称性作为一种归纳偏差可以帮助设计更适用于材料相关任务的物理启发深度学习算法, 实现更准确的预测. 此外, 探索基础模型在物质科学研究中的应用也很重要. 在自然语言处理和许多其他领域, 采用在大规模数据集上进行自监督预训练的基础模型, 并在特定任务上进行微调的思想已经取得了显著的成功. 将这种策略引入物质科学领域也可能带来显著的进展.

未来通过推广数据资源平台, 将领域内的人、仪器、数据紧密关联, 建成驱动计算物理发展的物质科学数据生态, 实现AI赋能, 发挥数据资源在新材料创制、物理规律发现、计算物理方法发展等方面的优势作用.

参考文献

- 1 O'Leary D E. Artificial intelligence and big data. *IEEE Intell Syst*, 2013, 28: 96-99
- 2 LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. *Nature*, 2015, 521: 436-444

- 3 Lye K O, Mishra S, Ray D. Deep learning observables in computational fluid dynamics. *J Comput Phys*, 2020, 410: 109339
- 4 Westermayr J, Gastegger M, Schütt K T, et al. Perspective on integrating machine learning into computational chemistry and materials science. *J Chem Phys*, 2021, 154: 230903
- 5 Curtarolo S, Setyawan W, Hart G L W, et al. AFLOW: An automatic framework for high-throughput materials discovery. *Comput Mater Sci*, 2012, 58: 218–226
- 6 Curtarolo S, Hart G L W, Nardelli M B, et al. The high-throughput highway to computational materials design. *Nat Mater*, 2013, 12: 191–201
- 7 Saal J E, Kirklin S, Aykol M, et al. Materials design and discovery with high-throughput density functional theory: The open quantum materials database (OQMD). *J Miner Metals Mater Soc*, 2013, 65: 1501–1509
- 8 Jain A, Ong S P, Hautier G, et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Mater*, 2013, 1: 011002
- 9 Attarian Shandiz M, Gauvin R. Application of machine learning methods for the prediction of crystal system of cathode materials in lithium-ion batteries. *Comput Mater Sci*, 2016, 117: 270–278
- 10 Behler J. Perspective: Machine learning potentials for atomistic simulations. *J Chem Phys*, 2016, 145: 170901
- 11 Butler K T, Davies D W, Cartwright H, et al. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 2018, 559: 547–555
- 12 Ye W, Chen C, Wang Z, et al. Deep neural networks for accurate predictions of crystal stability. *Nat Commun*, 2018, 9: 3800
- 13 Carleo G, Cirac I, Cranmer K, et al. Machine learning and the physical sciences. *Rev Mod Phys*, 2019, 91: 045002
- 14 Kulik H J, Hammerschmidt T, Schmidt J, et al. Roadmap on machine learning in electronic structure. *Electron Struct*, 2022, 4: 023004
- 15 Choudhary K, DeCost B, Chen C, et al. Recent advances and applications of deep learning methods in materials science. *npj Comput Mater*, 2022, 8: 59
- 16 Li H, Xu Y, Duan W. *Ab initio* artificial intelligence: Future research of Materials Genome Initiative. *Mater Genome Eng Adv*, 2023, 1: e16
- 17 Wang D, Zhou M, Huang D, et al. Management and application of research data in condensed matter science (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2024, 69: 1164–1174 [王丹, 周明波, 黄东宸, 等. 凝聚态物质科学科研数据管理与应用. 科学通报, 2024, 69: 1164–1174]
- 18 Wang D, Zhou M, Li Y, et al. Research on automated data acquisition technology of thin film growth. *Frontiers Data Comput*, 2023, 5:29–38
- 19 Condensed Matter Physics Data Center, Chinese Academy of Sciences. Characteristic Data Resources (in Chinese). 2024, <https://cmpdc.iphy.ac.cn/> [中国科学院凝聚态物质科学数据中心. 特色数据资源. 2024, <https://cmpdc.iphy.ac.cn/>]
- 20 Huang D, Liu J, Qian T, et al. Spectroscopic data de-noising *via* training-set-free deep learning method. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2023, 66: 267011
- 21 Foulkes W M C, Mitas L, Needs R J, et al. Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Rev Mod Phys*, 2001, 73: 33–83
- 22 Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 2017, 355: 602–606
- 23 Hermann J, Schätzle Z, Noé F. Deep-neural-network solution of the electronic Schrödinger equation. *Nat Chem*, 2020, 12: 891–897
- 24 Pfau D, Spencer J S, Matthews A G D G, et al. *Ab initio* solution of the many-electron Schrödinger equation with deep neural networks. *Phys Rev Res*, 2020, 2: 033429
- 25 Li X, Li Z, Chen J. *Ab initio* calculation of real solids *via* neural network ansatz. *Nat Commun*, 2022, 13: 7895
- 26 Scherbela M, Gerard L, Grohs P. Towards a transferable fermionic neural wavefunction for molecules. *Nat Commun*, 2024, 15: 120
- 27 Scherbela M, Reisenhofer R, Gerard L, et al. Solving the electronic Schrödinger equation for multiple nuclear geometries with weight-sharing deep neural networks. *Nat Comput Sci*, 2022, 2: 331–341
- 28 Snyder J C, Rupp M, Hansen K, et al. Finding density functionals with machine learning. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 253002
- 29 Kirkpatrick J, McMorrow B, Turban D H P, et al. Pushing the frontiers of density functionals by solving the fractional electron problem. *Science*, 2021, 374: 1385–1389
- 30 Hollingsworth S A, Dror R O. Molecular dynamics simulation for all. *Neuron*, 2018, 99: 1129–1143
- 31 Behler J, Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 146401
- 32 Zhang L, Han J, Wang H, et al. Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 143001
- 33 Unke O T, Chmiela S, Sauceda H E, et al. Machine learning force fields. *Chem Rev*, 2021, 121: 10142–10186
- 34 Chen C, Ong S P. A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. *Nat Comput Sci*, 2022, 2: 718–728

- 35 Deng B, Zhong P, Jun K J, et al. CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. *Nat Mach Intell*, 2023, 5: 1031–1041
- 36 Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 2023, 624: 80–85
- 37 Hegde G, Bowen R C. Machine-learned approximations to density functional theory Hamiltonians. *Sci Rep*, 2017, 7: 42669
- 38 Schütt K T, Gastegger M, Tkatchenko A, et al. Unifying machine learning and quantum chemistry with a deep neural network for molecular wavefunctions. *Nat Commun*, 2019, 10: 5024
- 39 Li H, Wang Z, Zou N, et al. Deep-learning density functional theory Hamiltonian for efficient *ab initio* electronic-structure calculation. *Nat Comput Sci*, 2022, 2: 367–377
- 40 Gong X, Li H, Zou N, et al. General framework for E(3)-equivariant neural network representation of density functional theory Hamiltonian. *Nat Commun*, 2023, 14: 2848
- 41 Li H, Tang Z, Gong X, et al. Deep-learning electronic-structure calculation of magnetic superstructures. *Nat Comput Sci*, 2023, 3: 321–327

Artificial intelligence and data-driven computational simulation

LI He¹, XU Yong^{1*}, DUAN WenHui¹, XIAO RuiJuan^{2*} & WENG HongMing^{2*}

¹ Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

² Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

*Corresponding authors (XU Yong, email: yongxu@mail.tsinghua.edu.cn; XIAO RuiJuan, email: rjxiao@iphy.ac.cn; WENG HongMing, email: hmweng@iphy.ac.cn)

“Big data + artificial intelligence” represents a novel research paradigm that will have a profound impact on future scientific research. In the field of computational physics, artificial intelligence and data-driven approaches are fostering the formation of new methodologies, and consequently giving rise to new significant scientific problems. This article will explore the emerging research area of artificial intelligence and data-driven computational simulations, review related research progress, and provide a perspective on future developments.

computational physics, artificial intelligence, data-driven

PACS: 31.15.Ar, 93.85.Bc, 82.20.Wt

doi: [10.1360/SSPMA-2024-0030](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0030)