

UCZENIE MASZYNOWE W ANALIZIE ENERGII KRYSZTAŁÓW ORGANICZNYCH

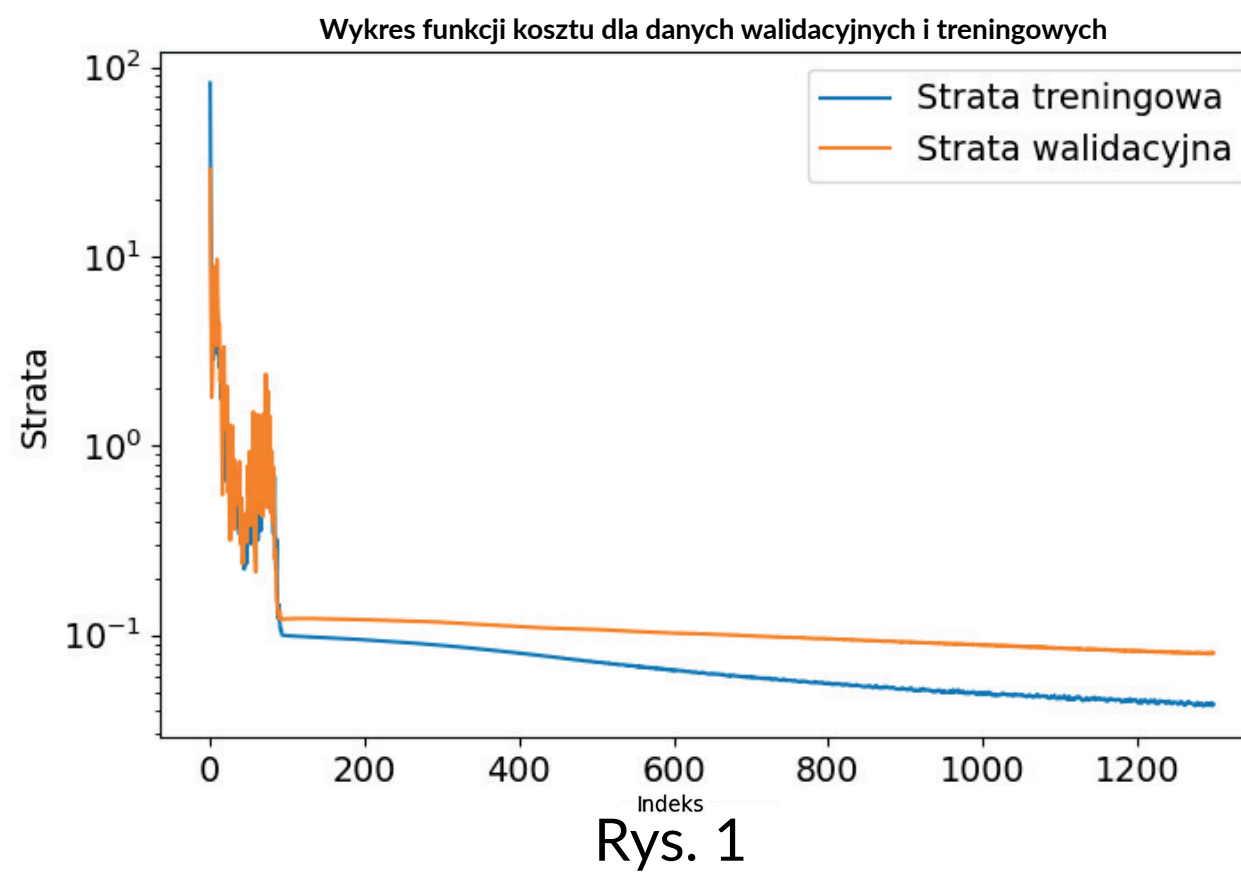
UPROSZCZONA ALTERNATYWA DLA MODELI UNIWERSALNYCH

Katarzyna Kuszner, Szymon Szymański, Alex Rymarski
Koordynatorka: Krystyna Syty

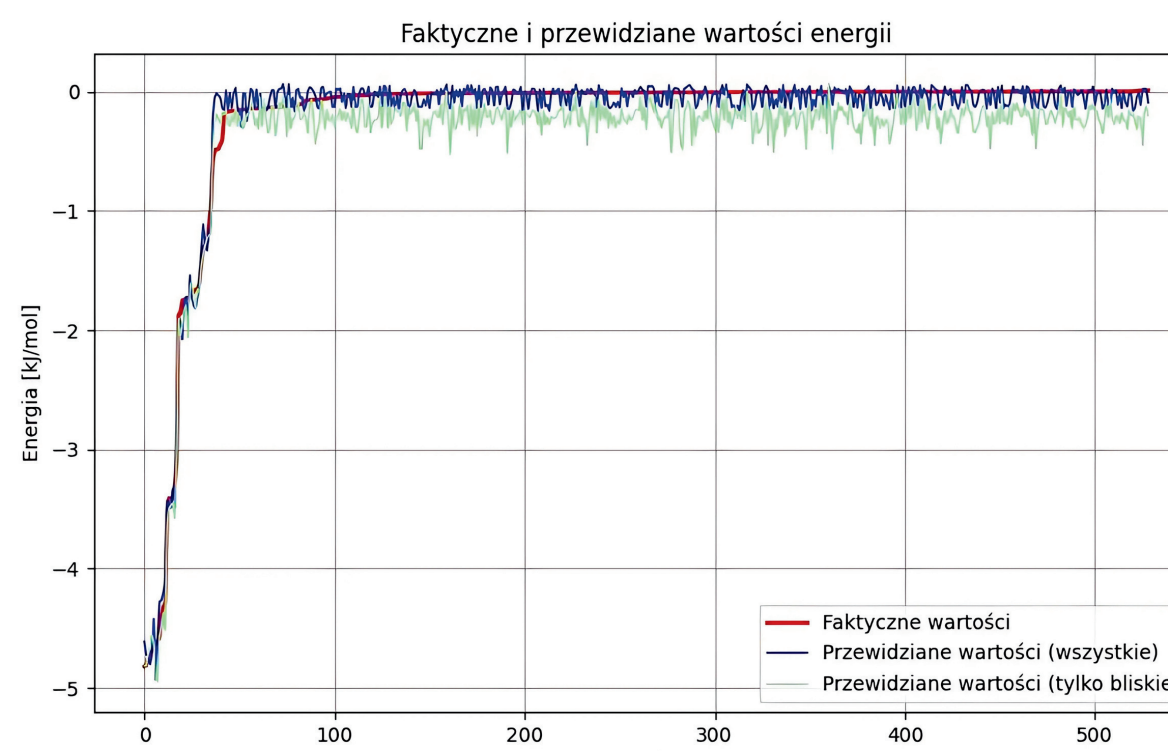
WSTĘP

Szybkie i dokładne liczenie energii cząsteczek w sieciach krystalicznych jest kluczowe przy projektowaniu nowych materiałów. Tradycyjne metody kwantowo-mechaniczne (np. DFT) są bardzo dokładne, ale kosztowne obliczeniowo. Z tego powodu szuka się alternatyw.

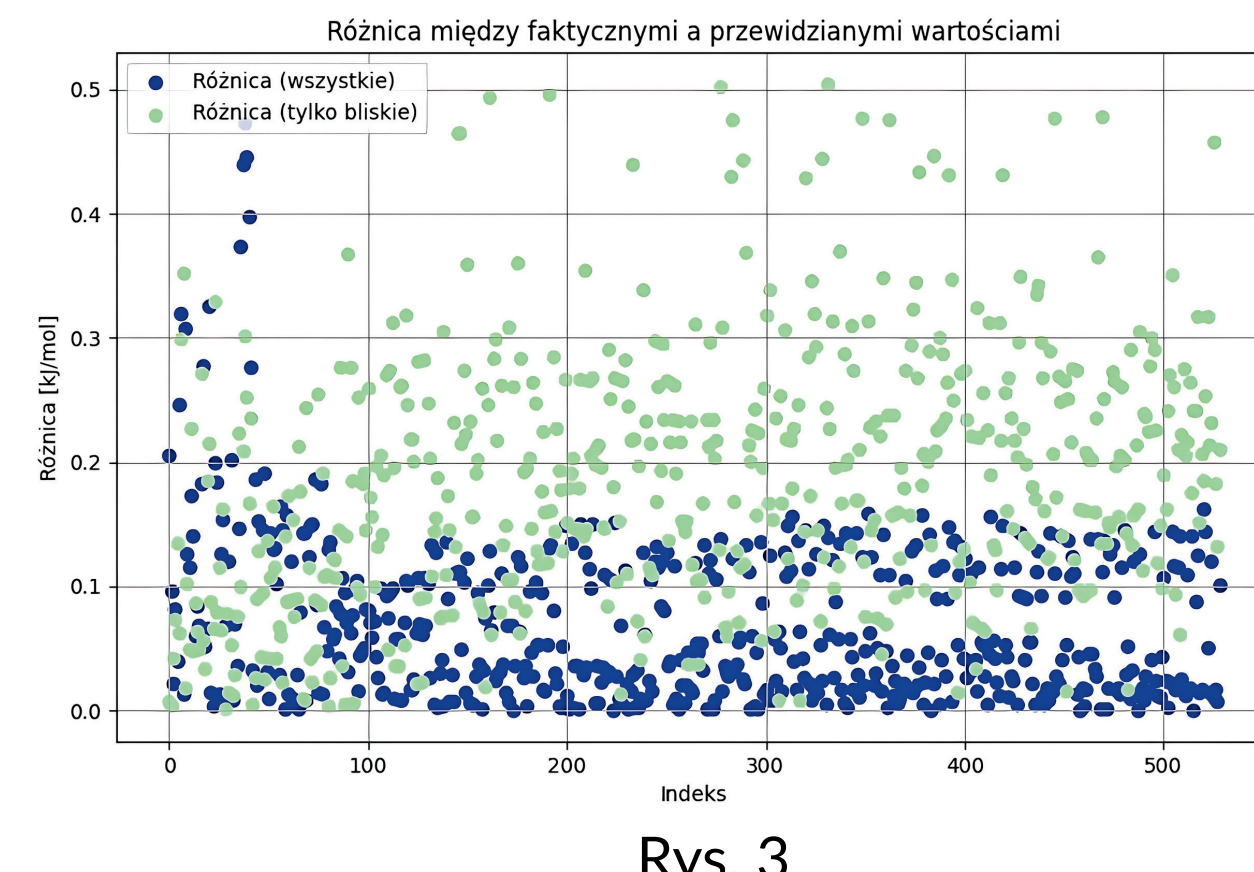
Celem naszego projektu było stworzenie sieci neuronowej, która uczyłaby się zależności między geometrią sieci krystalicznej, a energią układu. Taka sieć może liczyć energię dużo szybciej niż tradycyjne metody, co znacznie przyspiesza analizę i projektowanie nowych materiałów.



Rys. 1



Rys. 2



Rys. 3

Rodzaj energii sieci krystalicznej (298K)	Wartość
Przybliżenie Harmoniczne (HA)	79,7
Przybliżenie Quasi-Harmoniczne (QHA)	82,4
Przybliżenie Eksperymentalne	81,3
ALMUT (bliskie wartości)	39,3
ALMUT (wszystkie)	39,1

Tab.1

GENERACJA DANYCH

Naszym pierwszym krokiem było wygenerowanie zbiorów danych treningowych, walidacyjnych i testowych dla naszej sieci neuronowej. W tym celu przeprowadziliśmy symulacje dynamiki molekularnej dla kryształu naftalenu 2x2x2 komórek podstawowych za pomocą biblioteki Atomic Simulation Environment w Pythonie. Następnie z pomocą kalkulatora MACE wygenerowaliśmy deskryptory geometrii cząsteczki w danej chwili, które zawierają w sobie informację o geometrii i fizyce cząsteczki oraz są łatwo odczytywalne przez program. Wraz z energią danej cząsteczki stanowiły one potrzebne nam zbiory danych.

MODEL

Nasza sieć neuronowa została stworzona używając biblioteki TensorFlow w Pythonie. Przyjmuje ona na wejściu deskryptor geometrii cząsteczki. Deskryptor występuje w postaci 256 liczb na każdy atom danej cząsteczki. W przypadku dimeru naftalenu, 36 atomów razy 256 liczb daje nam 9216 liczb na wejściu.

Zdecydowaliśmy się użyć 6 warstw ukrytych oraz architektury sieci gęstej (każdy neuron z warstwy N jest połączony z każdym neuronem warstwy N-1). Na wyjściu nasza sieć daje nam jedną liczbę – energię danego dimeru.

Layer (type)	Output Shape	Param #
input (InputLayer)	(None, 9216)	0
1 (Dense)	(None, 1024)	9,438,208
2 (Dense)	(None, 512)	524,800
3 (Dense)	(None, 256)	131,328
4 (Dense)	(None, 128)	32,896
5 (Dense)	(None, 32)	4,128
6 (Dense)	(None, 8)	264
output (Dense)	(None, 1)	9

Total params: 10,131,633 (38.65 MB)

Schemat naszej sieci neuronowej

WYNIKI

Model (Rys.1) osiągnął poziom nauczania wystarczający, by uzyskane z niego dane można było użyć do dalszych obliczeń.

Przetestowaliśmy dokładność naszego modelu przy różnych bazach danych testowych (Rys. 2 i Rys. 3). Pierwszy model (zielony) został wytrenowany na danych, które uwzględniają tylko oddziaływania krótkie, a drugi model (niebieski) został wytrenowany na wszystkich danych. Możemy zauważyć, że pierwszy model radzi sobie bardzo dobrze z przewidywaniem krótkich oddziaływań, ale przy dużych odległościach zaczyna generować spory szum. Z kolei drugi model generuje mniejszy szum na dużych odległościach, ale przewiduje krótsze z mniejszą dokładnością. W obu przypadkach model ma większe problemy z przewidywaniem energii na dużych odległościach, co zgodnie z literaturą jest często spotykanym problemem przy tego typu sieciach neuronowych.

Po porównaniu naszych wyników z danymi w literaturze (Tab. 1) możemy stwierdzić, że nasz model przewiduje energię sieci krystalicznej z odpowiednią dla naszych warunków precyzją.

- Syty, K., Czekajo, G., Pham, K. N. i Modrzejewski, M., 'Multi-Level Coupled-Cluster Description of Crystal Lattice Energies', *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2025, 21, 5533–5544
- Batatia, I., Benner, P., Chiang, Y., i inni, 'A foundation model for atomistic materials chemistry'