



Андрей Будников
Александр Романов

NNMD: программный пакет для обучения межатомных потенциалов с использованием функций Бехлера- Парринелло

Воронежский государственный университет

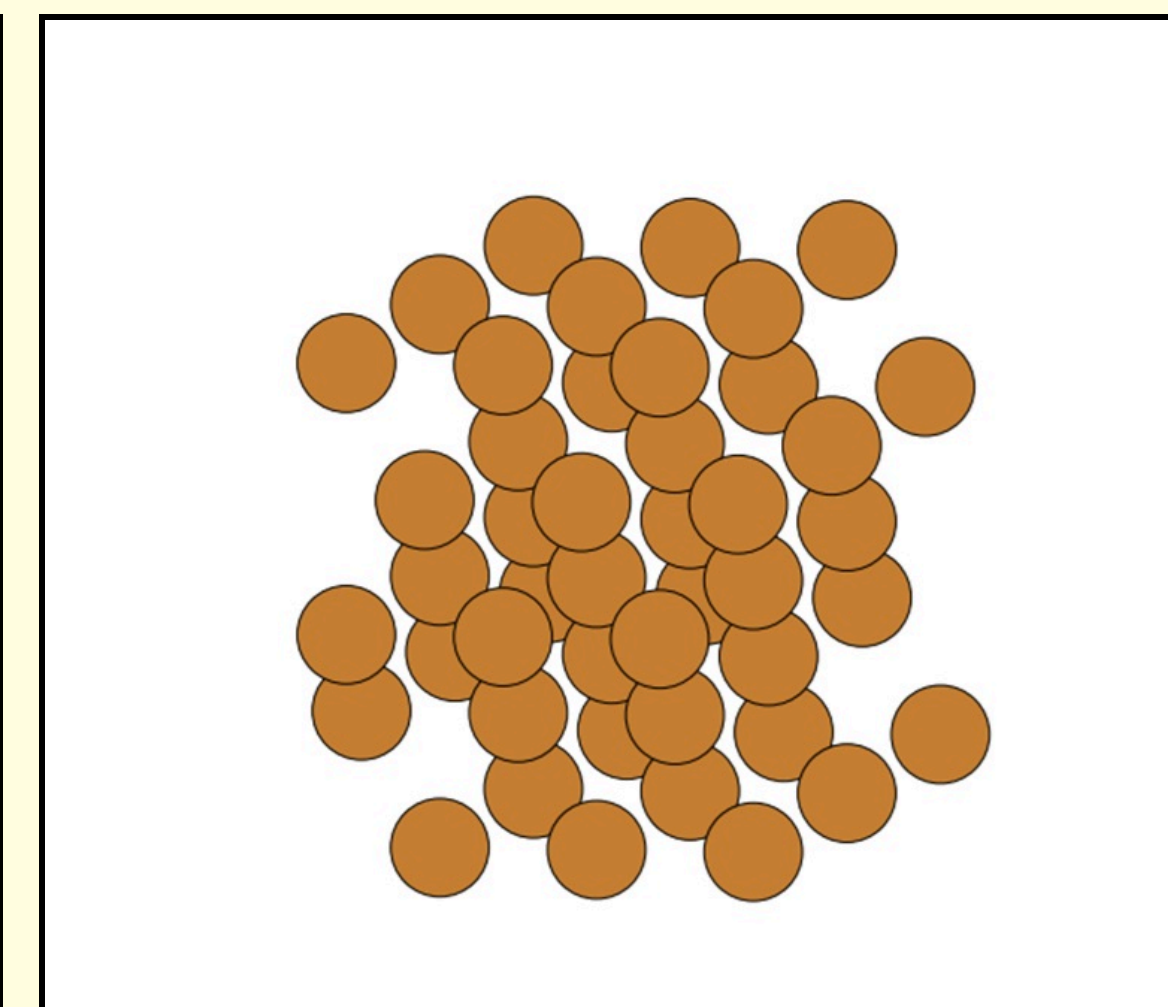
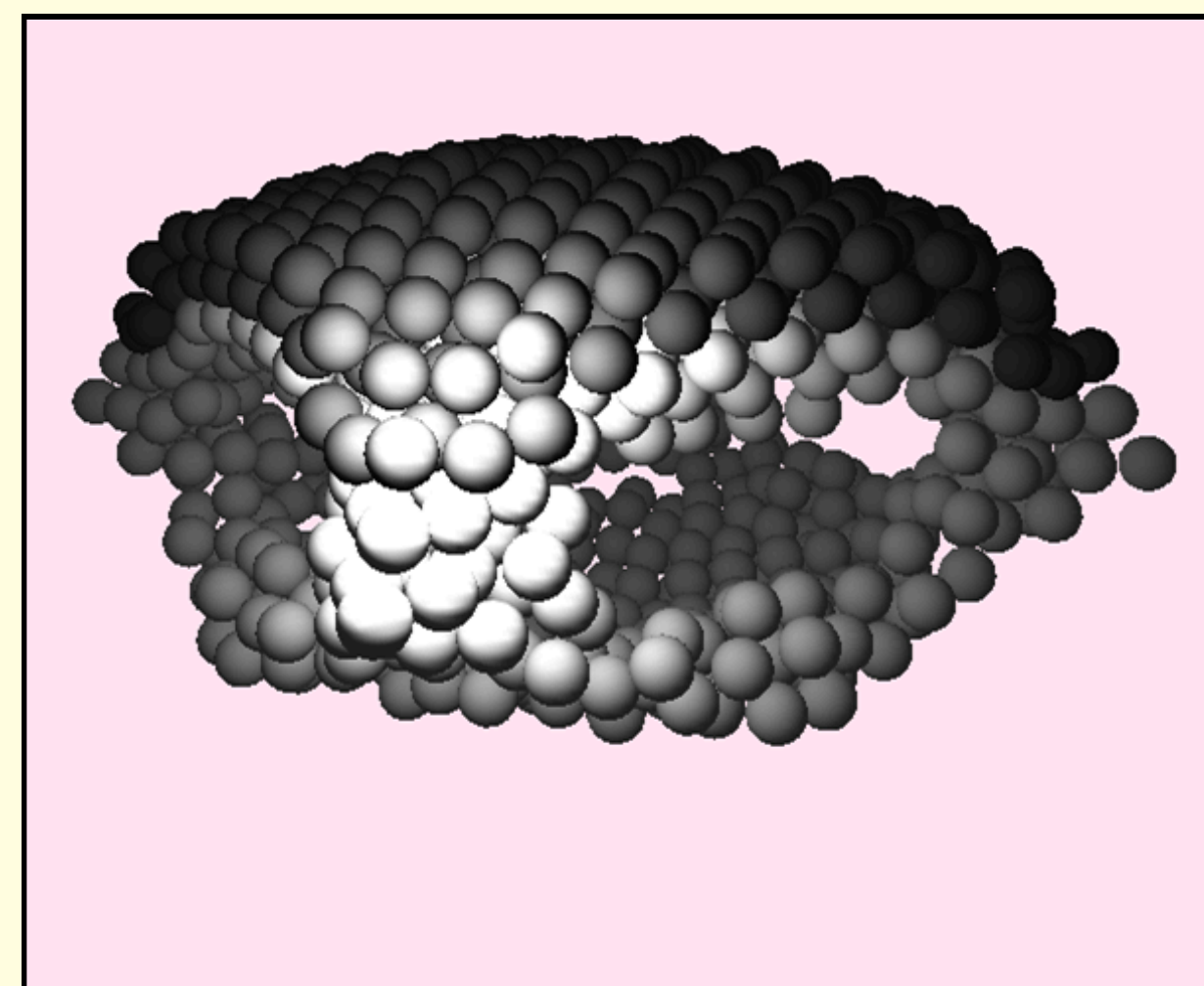
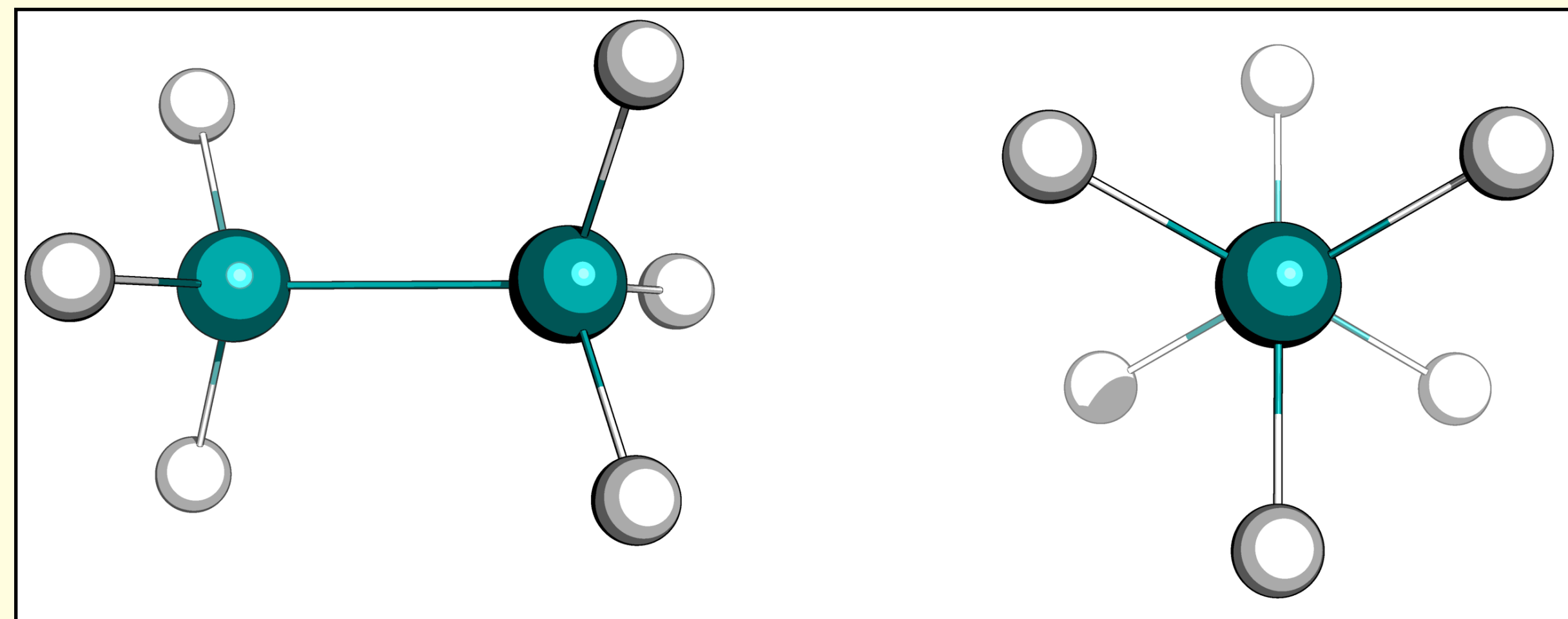
OBJECTIVE

Введение

Для исследования свойств молекул и материалов требуется моделировать атомные системы и их динамику во времени.

Моделирование можно проводить двумя способами:

- 1. Квантово-химические методы:** решение уравнения Шредингера или его вариации - ресурсоемкие и медленные;
- 2. Метод молекулярной динамики:** интегрирование уравнений движения - меньшая точность, меньше ресурсов и времени на решение, **требуется определить межатомные потенциалы.**

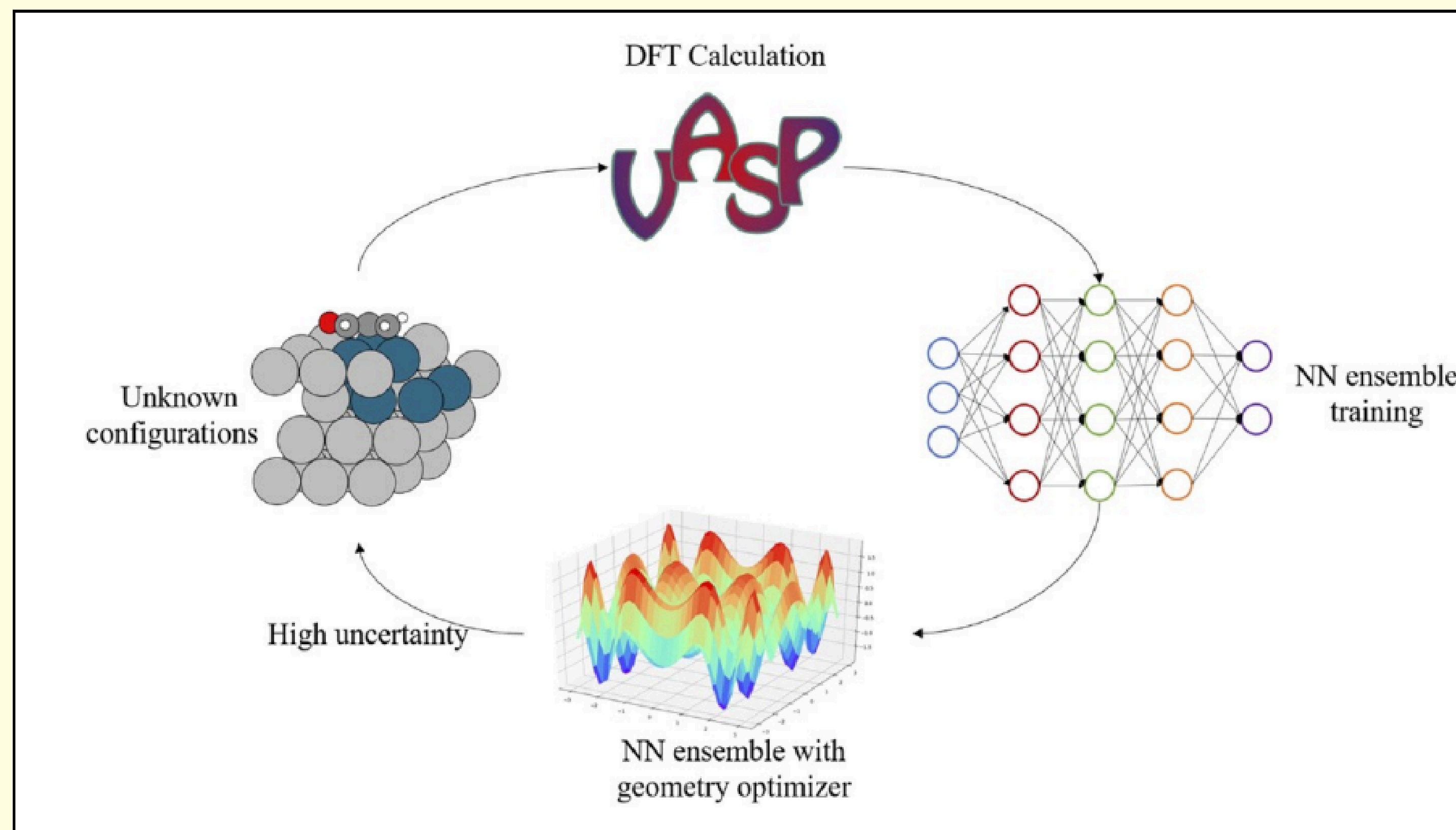


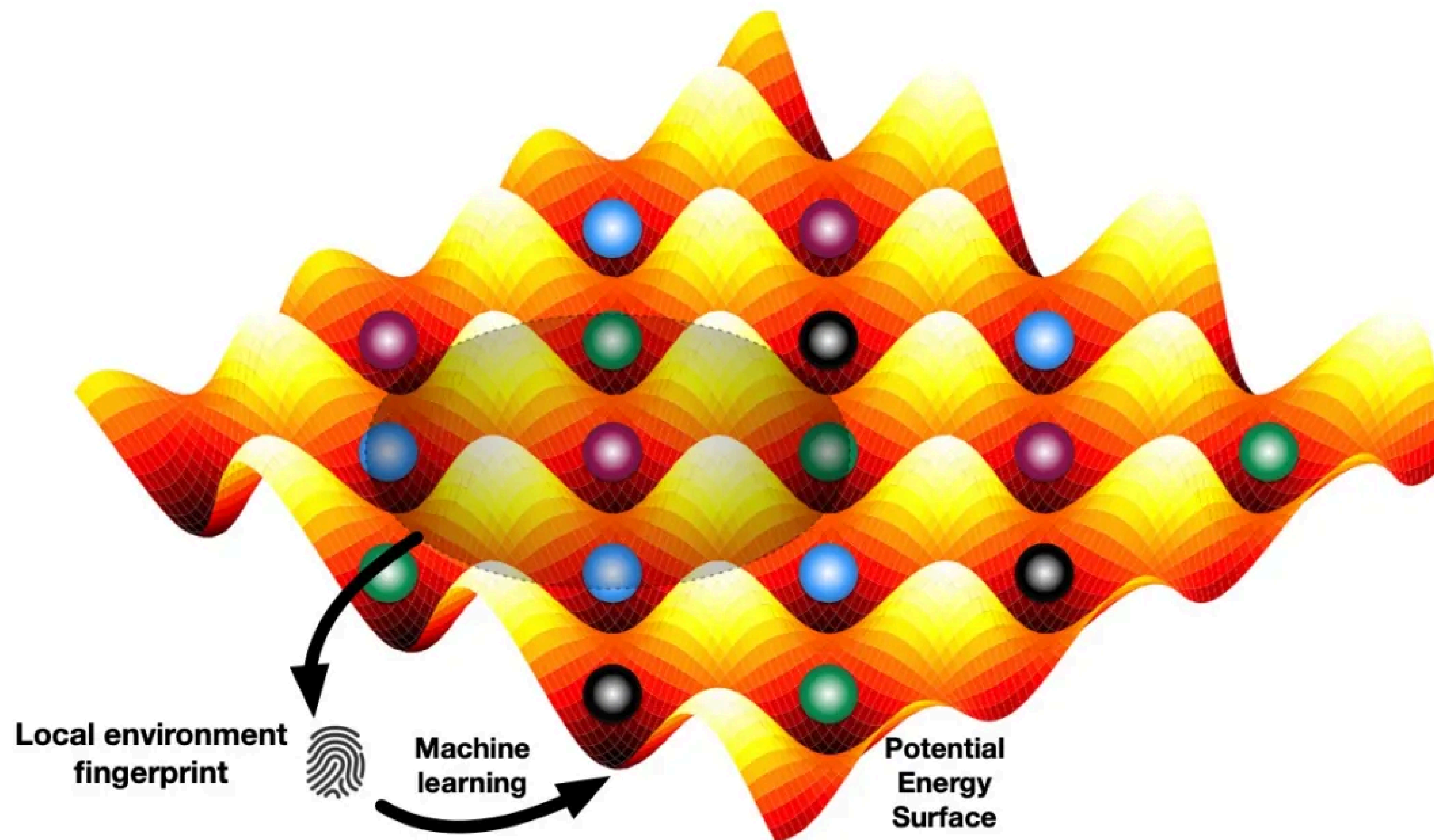
OBJECTIVE

Зачем и как выбирать межатомные потенциалы?

Моделирование методом молекулярной динамики требует **явного определения** межатомного потенциала для исследуемой системы. Его подбор является **очень затратной задачей**.

Одним из решений проблемы выбора является реализация модели **машинно-обучаемых потенциалов**, которая, обучившись на экспериментальных или ab initio данных, может использоваться в моделировании, при этом обладая высокой масштабируемостью на большие системы.





СТРУКТУРА МАШИННО-ОБУЧАЕМОГО ПОТЕНЦИАЛА

Embedding/Fingerprint

Функции Бехлера-Парринелло

Эмбединги сохраняют информацию о **локальном окружении** каждого атома, при этом формируя их уникальное описание в системе

Neural Network Model

Нейронная сеть Бехлера-Парринелло

BPNN является **ансамблем нейронных сетей** (нейронной сетью высокой размерности), где каждая подсеть отвечает за аппроксимацию энергий на одном конкретном атоме



Prof. Jörg Behler



Prof. Michele Parrinello

Practical Results

Получаемые характеристики системы

На выходе модель выдает полную энергию системы. Через градиенты энергии и дескрипторов вычисляются силы

EMBEDDING: ФУНКЦИИ БЕХЛЕРА-ПАРРИНЕЛЛО

Свойства функций Бехлера-Парринелло

- **Симметричность:** форма функций гарантируют инвариантность получаемой энергии относительно ротации, трансляции, а также перестановки атомов одного элемента
- **Локальность:** с ростом межатомного расстояния значения дескрипторов должны устремляться к нулю
- **Уникальность:** для каждого атома гарантируется уникальное описание окружения

Набор функций G формирует **вектор-дескриптор** для каждого атома системы.

Чтобы ускорить обучение модели и вычисление функций вводится специальная **функция отсечки:**

$$f_c(R_{ij}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\cos\left(\frac{\pi R_{ij}}{R_c}\right) + 1 \right), & R_{ij} \leq R_c \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

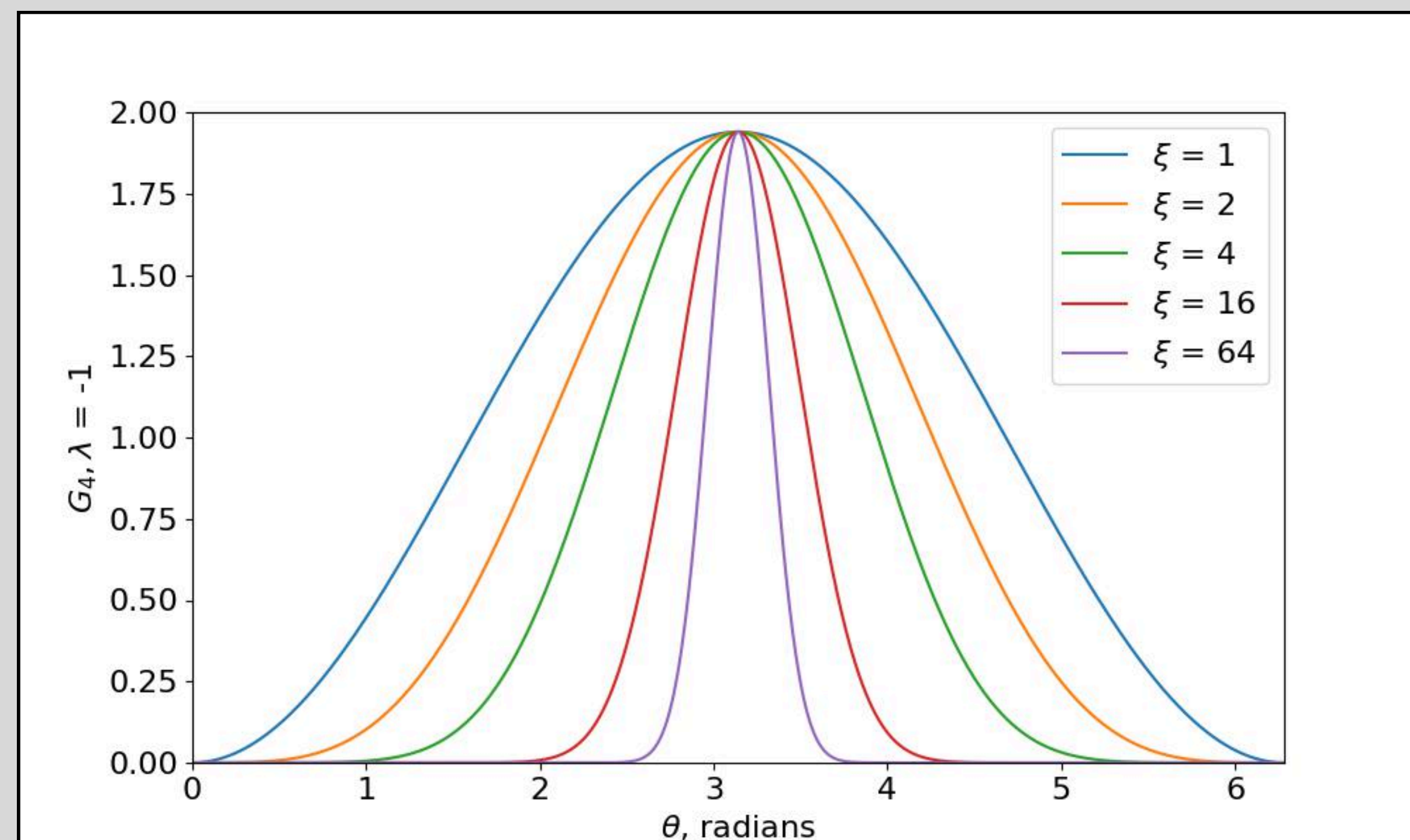
$$G_i^1 = \sum_j f_c(R_{ij})$$

$$G_i^2 = \sum_j e^{-\eta(R_{ij}^2 - R_s)} f_c(R_{ij})$$

$$G_i^3 = \sum_j \kappa \cos(R_{ij}) f_c(R_{ij})$$

$$G_i^4 = 2^{1-\zeta} \sum_{j,k \neq i} (1 + \lambda \cos \theta_{ijk}) e^{-\eta(R_{ij}^2 + R_{jk}^2 + R_{ik}^2)} f_c(R_{ij}) f_c(R_{ik}) f_c(R_{jk})$$

$$G_i^5 = 2^{1-\zeta} \sum_{j,k \neq i} (1 + \lambda \cos \theta_{ijk}) e^{-\eta(R_{ij}^2 + R_{ik}^2)} f_c(R_{ij}) f_c(R_{ik})$$



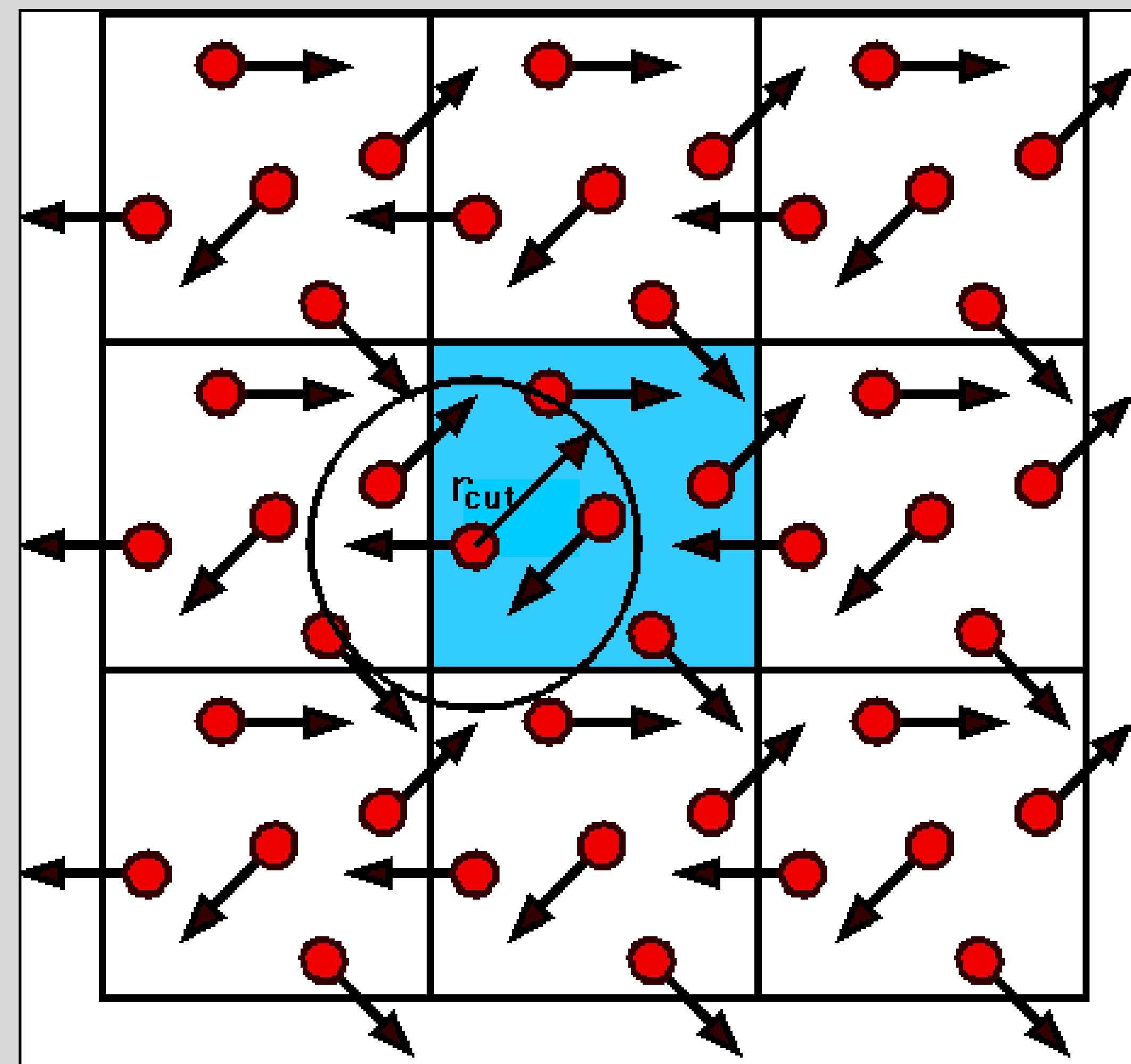
Преимущества использования

Для построения модели машинного обучения, применимой для моделирования атомной системы, критически важны **два** момента:

- **большой объем датасета**
- **уникальное описание атомной конфигурации**

Использование функций Бехлера-Парринелло позволяет удовлетворить эти требования.

Однако, их применение затруднено ввиду необходимости **подбирать параметры для каждой функции**, а также учета **периодических граничных условий (Periodic Boundary Conditions - PBC)** при непосредственном вычислении.



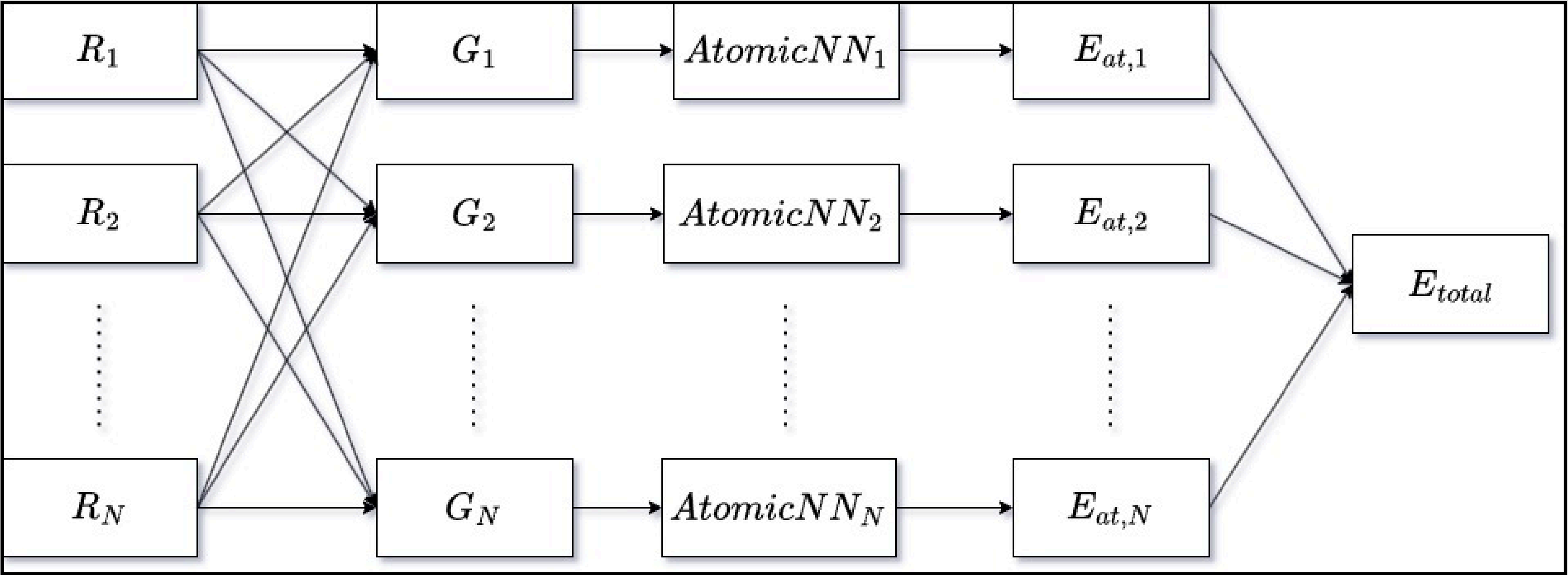
НЕЙРОННАЯ СЕТЬ БЕХЛЕРА-ПАРРИНЕЛЛО

Модель представляет **нейронную сеть высокой размерности (High-Dimensional Neural Network - HDNN)**

В рамках модели каждому атому ставится в соответствие **вектор-дескриптор $\mathbf{G}$** , который, в свою очередь, является входом атомных подсетей (**AtomicNN**). Подсети аппроксимируют энергию каждого атома, полная энергия - сумма выходов.

Для атомов одного химического элемента структура и веса атомной подсети идентичны, т.е. **количество атомных подсетей напрямую зависит от количества химических элементов в системе.**

Функция потерь - сумма взвешенных среднеквадратичных ошибок.



$$\Gamma = \frac{e_{rel}}{M} \sum_{i=1}^M \left(\frac{E_i^{NN} - E_i^{DFT}}{N_i} \right)^2 + \frac{f_{rel}}{M} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} |F_{ij}^{NN} - F_{ij}^{DFT}|^2$$

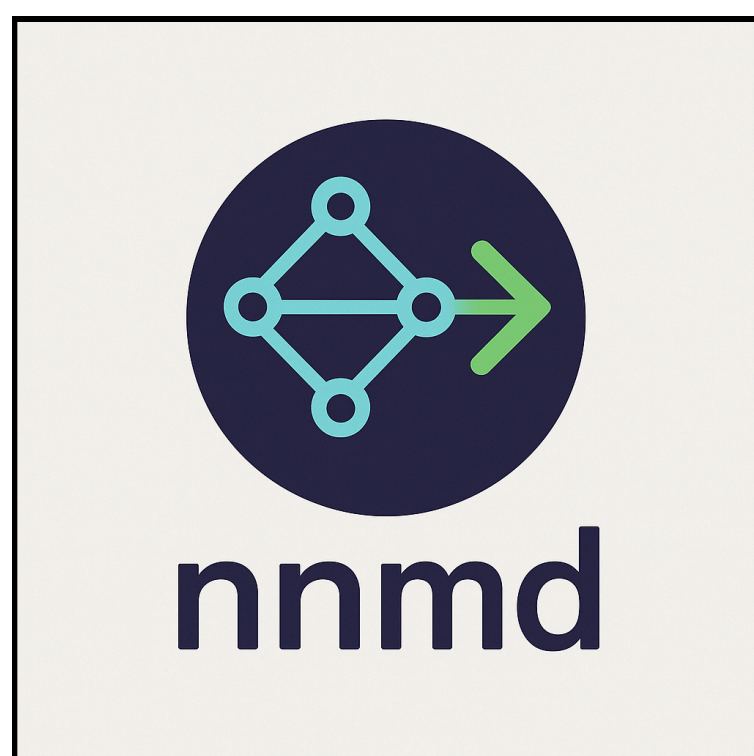
$$\Gamma = e_{rel}MSE(E) + f_{rel}MSE(F)$$

ПРОЕКТ NNMD И ЕГО ЦЕЛИ

NNMD - Neural Networks for Molecular Dynamics

NNMD - программный пакет с открытым исходным кодом для создания машинно-обучаемых потенциалов на Python с применением фреймворка PyTorch. Разрабатывается для нужд и под архитектуру Суперкомпьютерного центра ВГУ.

Проект все еще в разработке, доступна альфа-версия проекта на [GitHub](#).



PyTorch



Особенности решения

Чистый Python-пакет

Пакет реализован только на Python, вся математика реализована через тензорные операции PyTorch

Модульность пакета

Пакет разбит на модули, позволяя пользователю импортировать только нужные инструменты

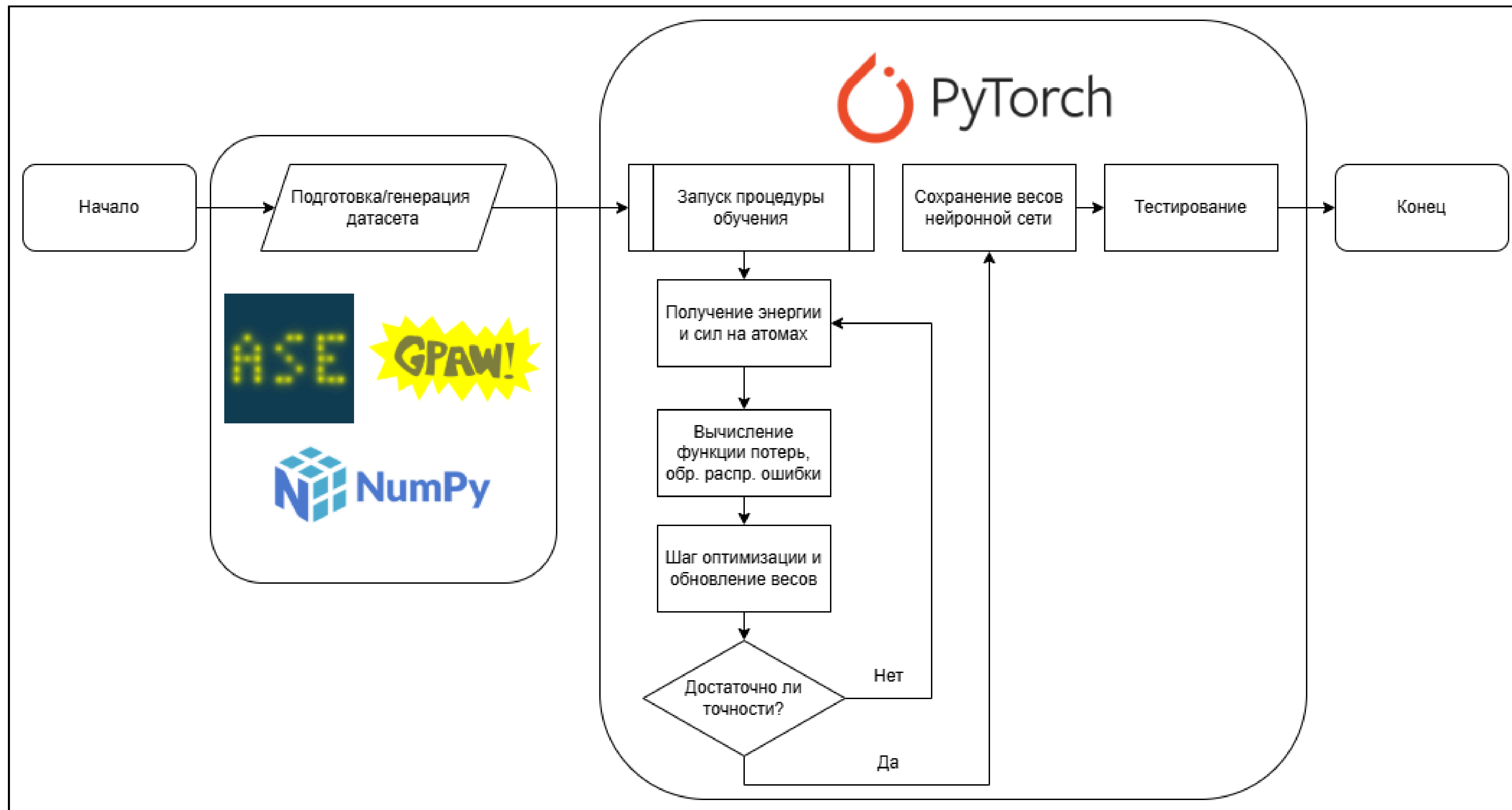
Простота использования

Интерфейс пакета достаточно интуитивен и прост, чтобы пользователь мог без труда проанализировать работу кода

Легкость развертывания и поддержки

Пакет реализуется как чистый Python-пакет, что делает его легко обновляемым и быстро развертываемым решением

Процедура обучения в NNMD



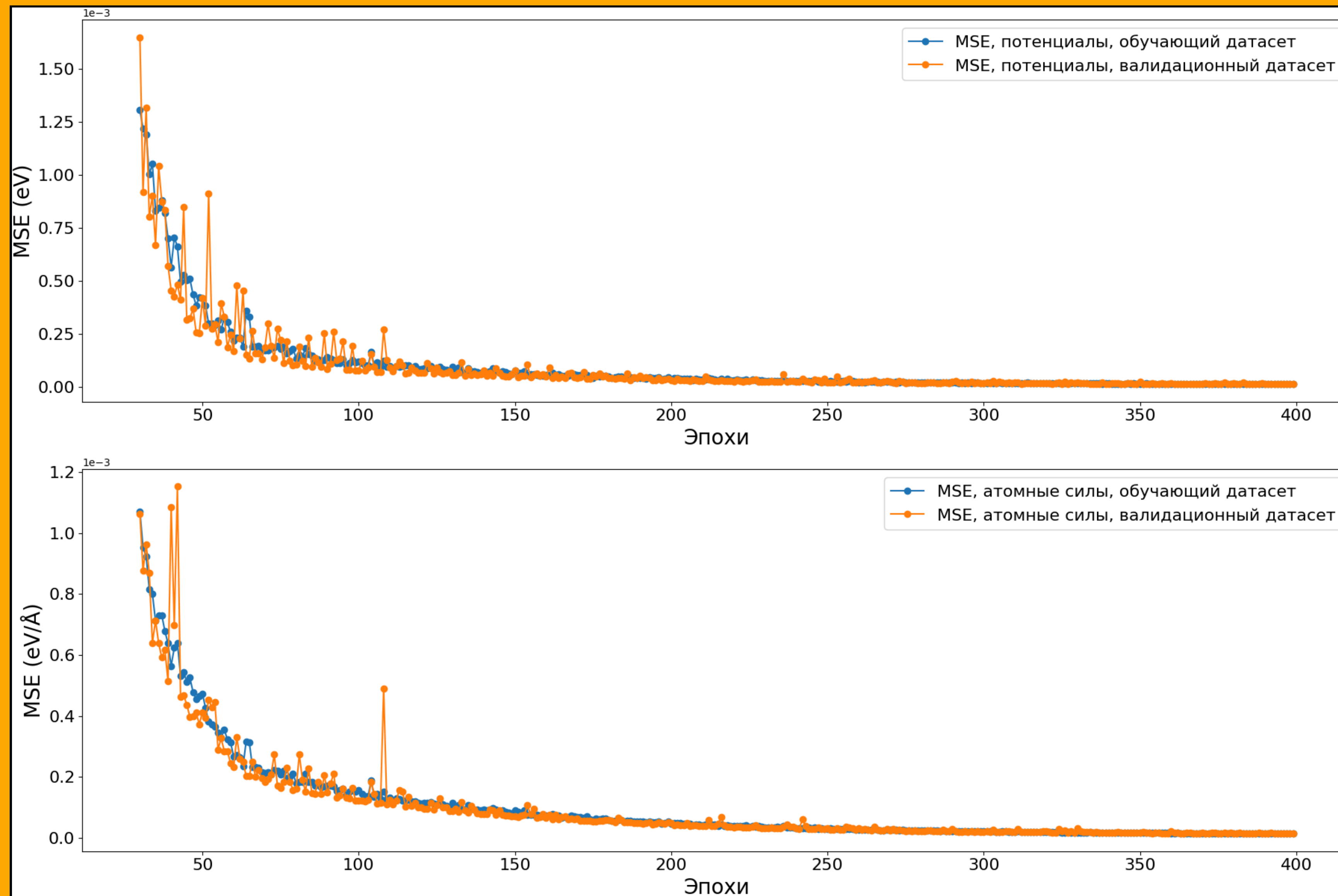
Примеры обучения

Потенциал Леннарда-Джонса

Рассмотрим простую систему из трех (тример) атомов лития.

В качестве дескрипторов взяты три функции G_1 с разными радиусами отсечки (2.0, 2.5 и 3.0 Å).

Несмотря на начальные осцилляции ошибки стабилизировались у значений порядка 10^{-5} .



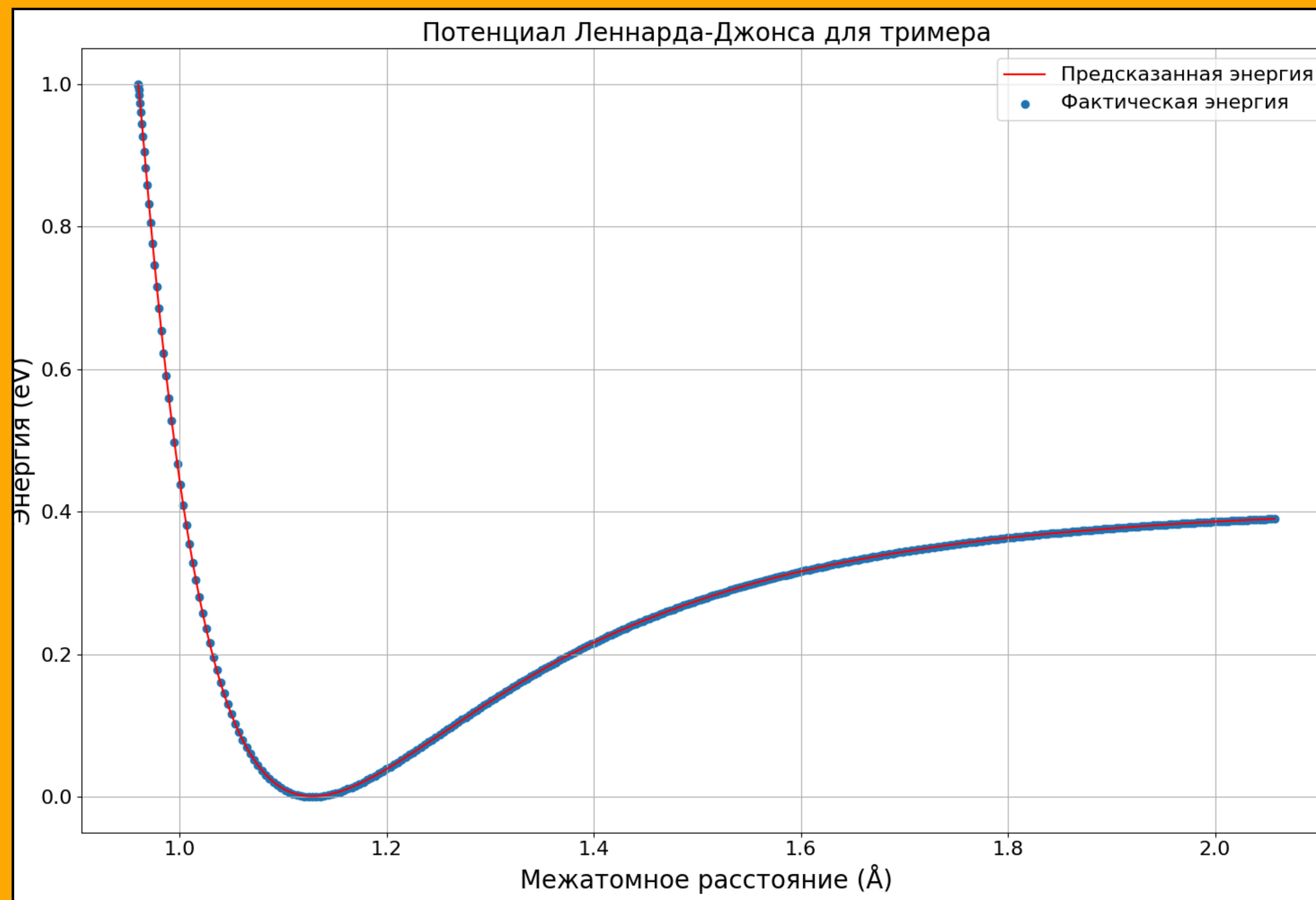
Примеры обучения

Восстановление потенциала LJ

Потенциал Леннарда-Джонса полностью восстанавливается, динамика сохраняется, расхождение незначительно.

Для описания атомов хватило 3-х радиальных функций, т.е. модель не учитывает углы между межатомными расстояниями.

В реальности, для более сложных атомных структур требуется учитывать взаимодействия между триплетами атомов.

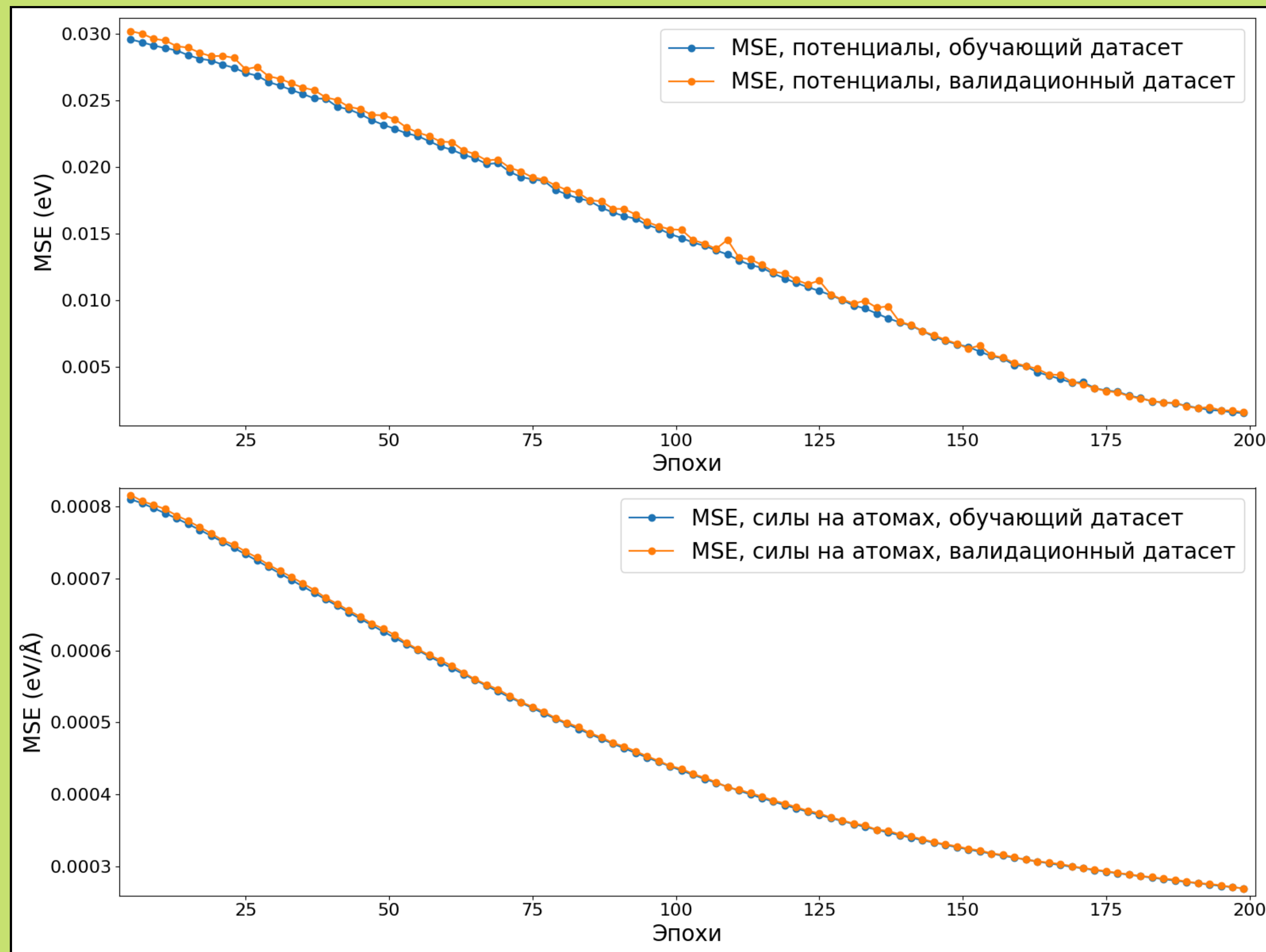


Примеры обучения

Кристалл из 27 атомов Li

Для описания атомов лития использовались 12 функций G_2 и 2 функции G_4 , радиус отсечки - 3.54 Å.

Несмотря на то, что нейронная сеть выдает энергии и силы с расхождением порядка 0.0001, **обученная модель не применима для реального эксперимента.**

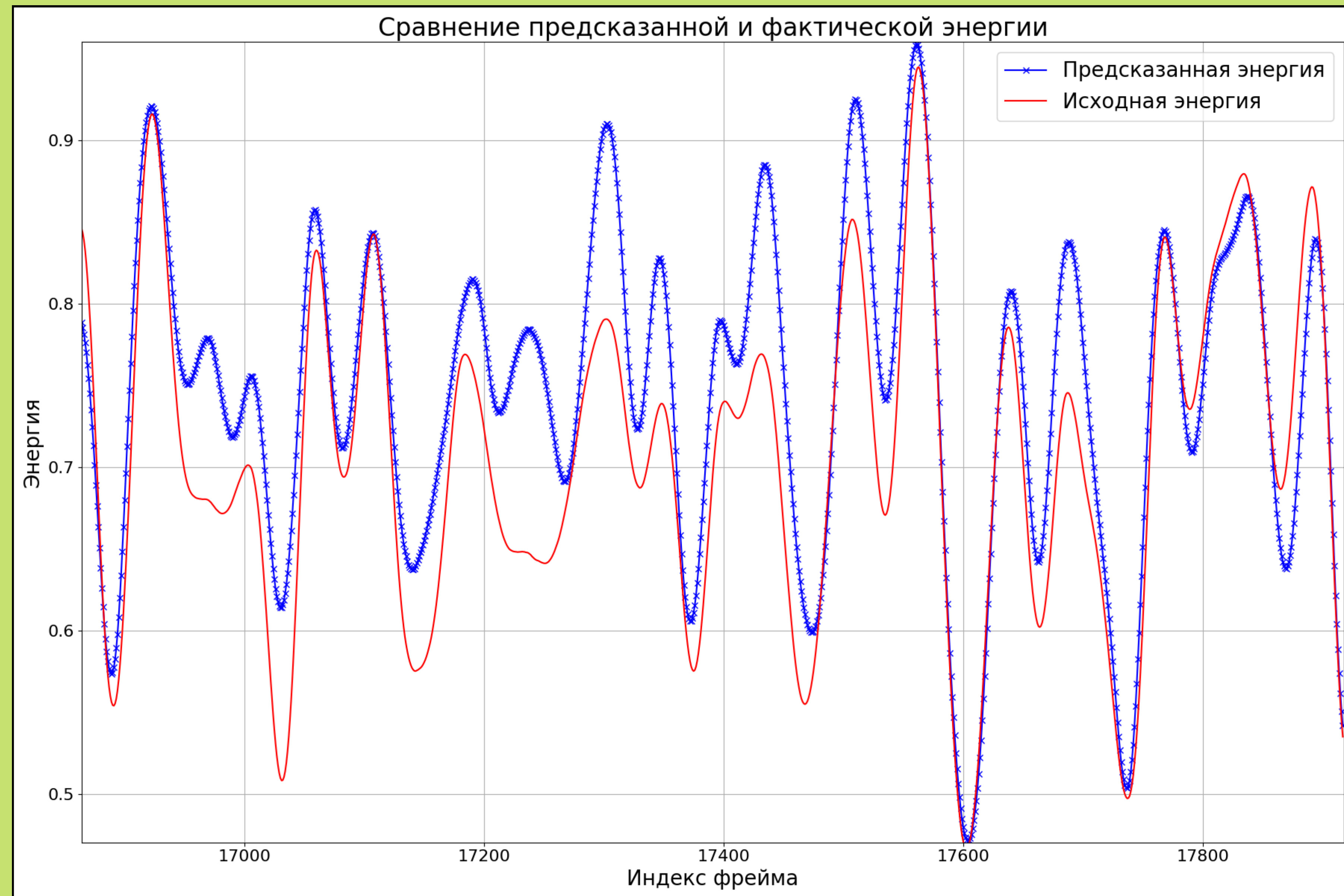


Примеры обучения

Связь между точностью и дескрипторами

Несмотря на универсальность нейронных сетей как аппроксиматоров от качества входных значений зависит точность.

Выбор набора дескрипторов, чаще всего, не выглядит очевидным и является задачей отдельного исследования.



Дальнейшие планы по развитию проекта

Задачи для реализации

Реализация функций Бехлера-Парринелло на случай многоэлементных систем

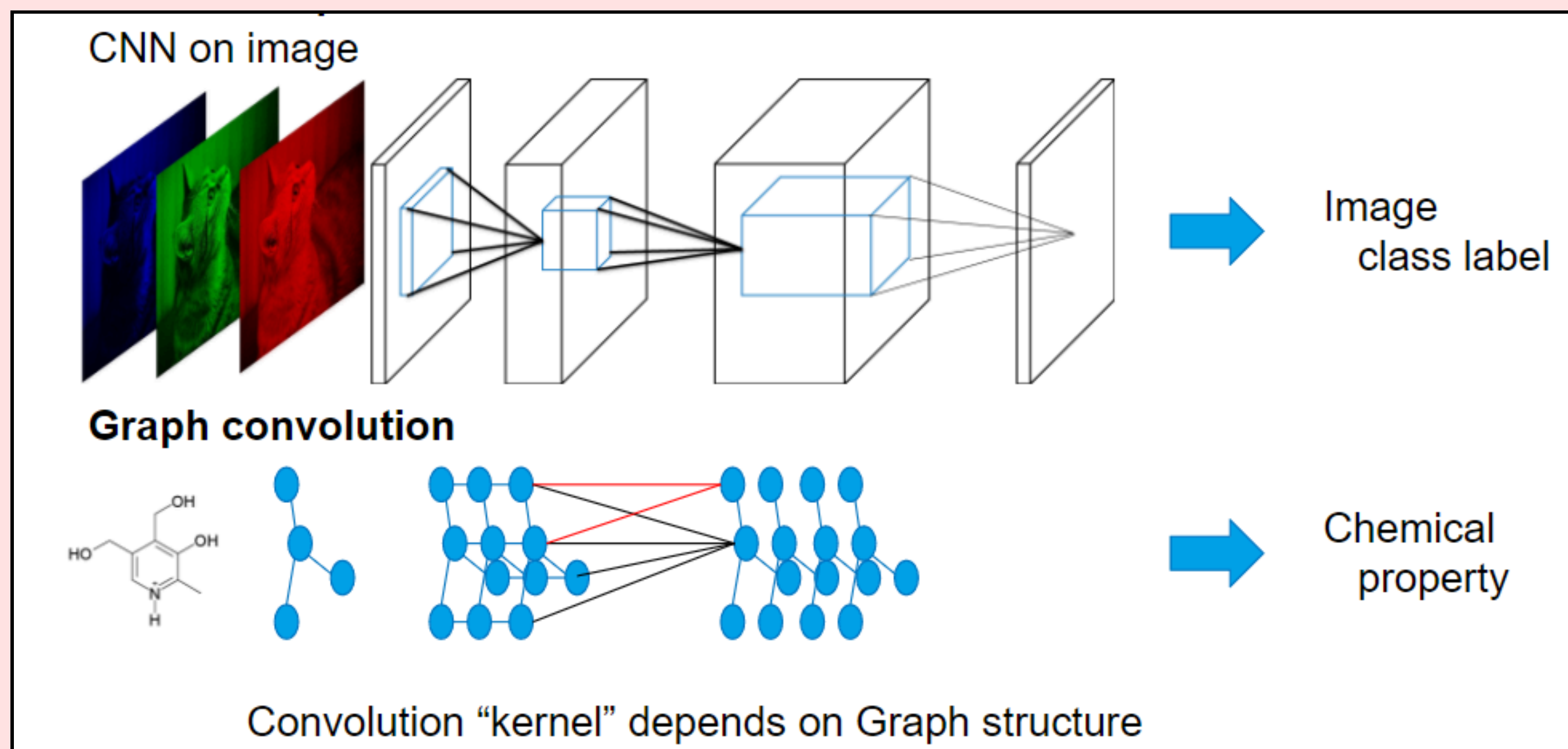
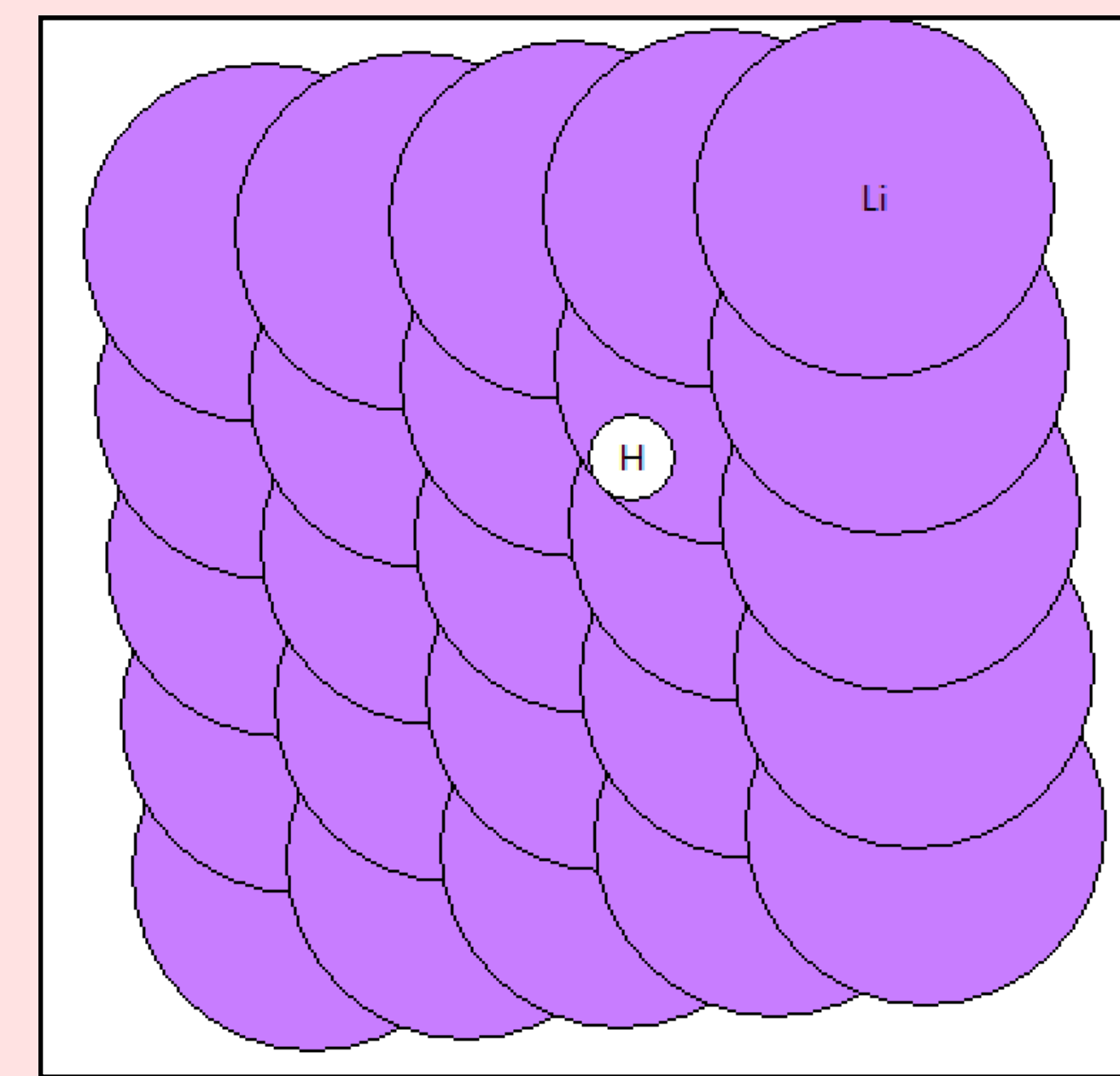
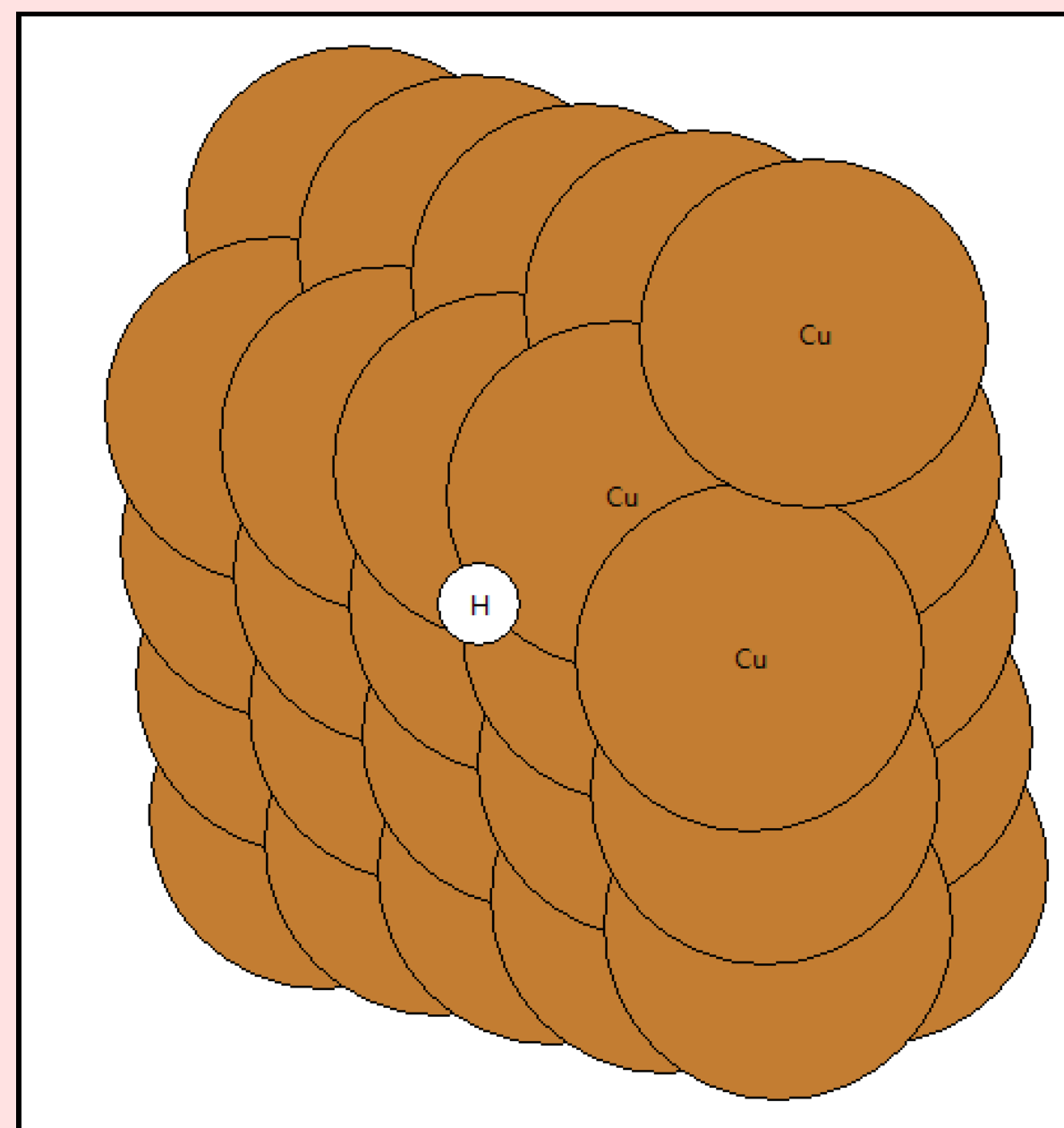
Для реальных экспериментов требуется учитывать ситуации химических связей между разными сортами атомов

Модификация BPNN, добавление слоя эмбединга

Добавление обучаемого слоя эмбединга может повысить точность обучения на несбалансированных датасетах, а также открыть доступ к Transfer Learning

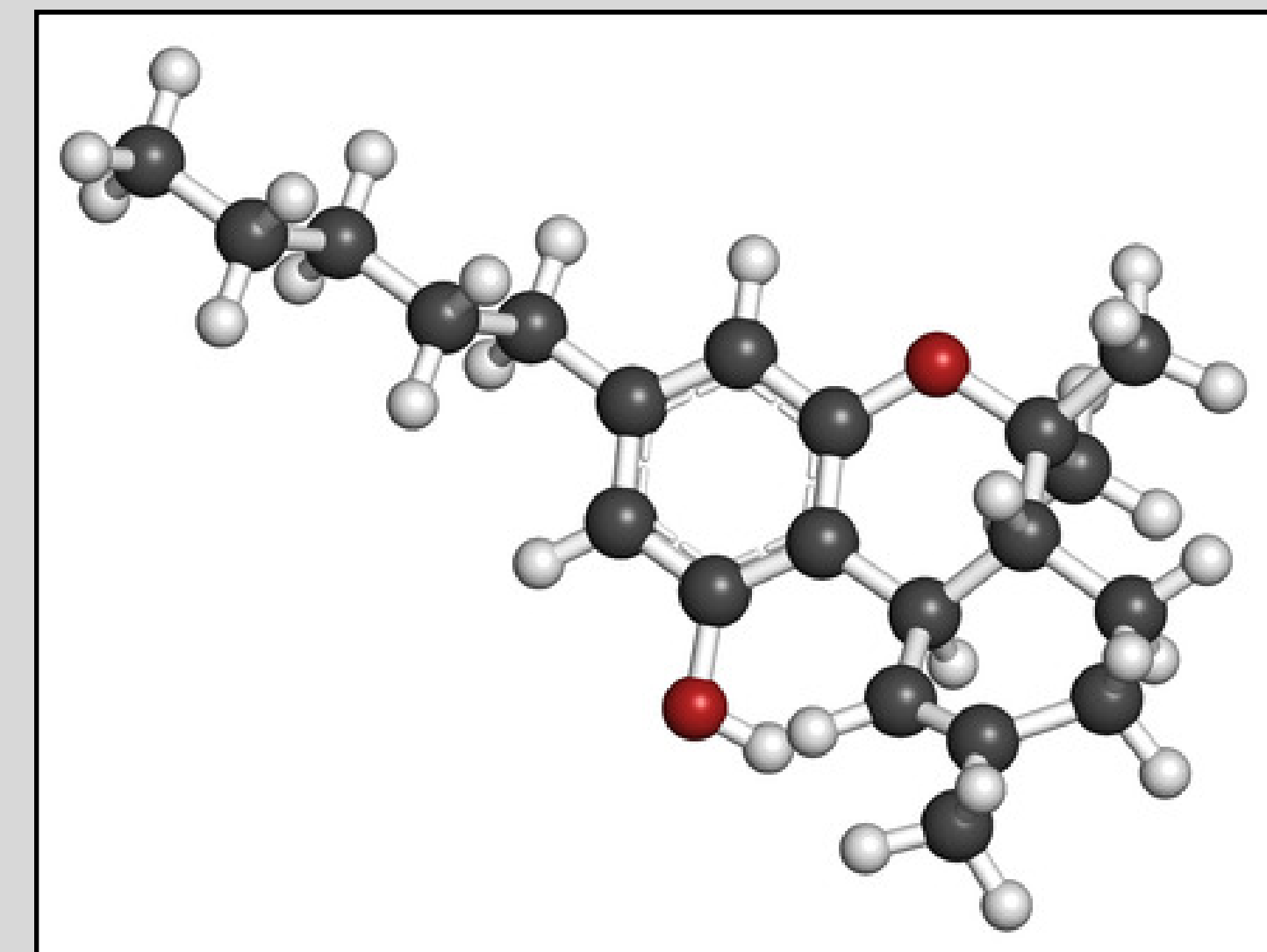
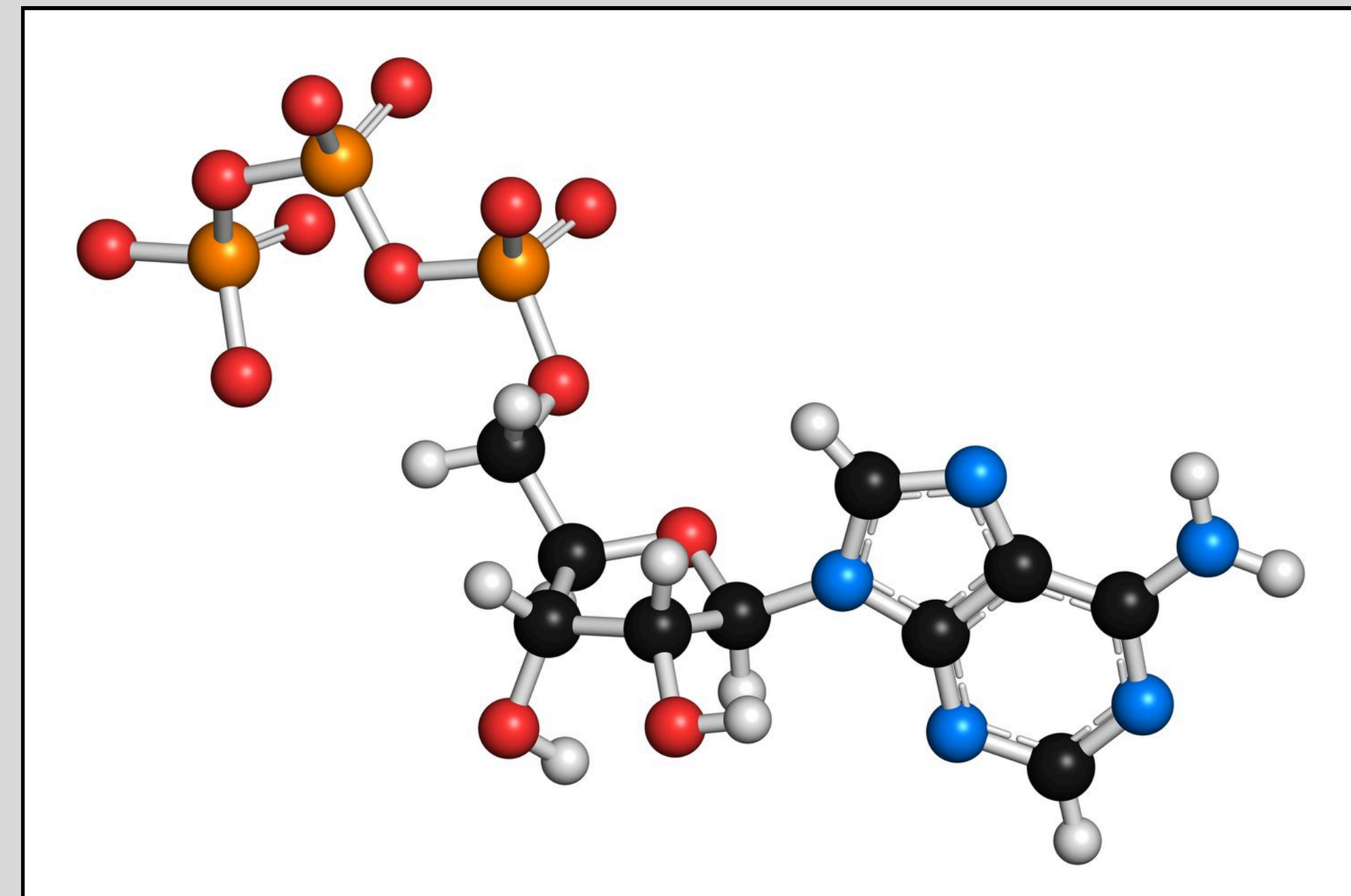
Graph Convolutional Neural Network

Атомные системы могут быть представлены как полносвязный граф, что позволяет использовать сверточные нейронные сети для моделирования



Заключение

- **Машинно-обучаемые потенциалы** - мощный инструмент молекулярной динамики, позволяющий исследовать сложные атомные системы и их динамику
- Чтобы реализовать машинно-обучаемый потенциал требуется специальные дескрипторы - **функции Бехлера-Парринелло** - и специальная архитектура нейронной сети - нейронная сеть **Бехлера-Парринелло**
- Представлен программный пакет **NNMD** для создания машинно-обучаемых потенциалов
- Показаны некоторые примеры обучения и потенциальные проблемы при этом.
- Приведены идеи и планы развития представленного программного решения.





Спасибо за внимание!

Ссылка на проект: <https://github.com/ded-otshelnik/nnmd>