Strojno učenje svojstava materijala na podacima različite točnosti

Fran Krčelić

Fizika materijala

Predmet promatranja su atomi i strukture koje formiraju

Problem: energija sustava i sile na atome

Rješenje: ploha potencijalne energije (PSE)

- ❖ Schrödingerova jdb
- ❖ Računalne simulacije
- ❖ Neuralne mreže?

Računalne simulacije

DFT (Density-Functional Theory)

- ❖ Precizni rezultati
- ❖ Velika složenost => mali sustavi

"polja sile" (force fields)

- ❖ Aproksimacija potencijala jednostavnim članovima
- ❖ Manja složenost => manja preciznost

Tipovi strojnog učenja

Nadzirano učenje

- ❖ Predviđeni set podataka
- ❖ "Loss" funkcija

Nenadzirano učenje

- ❖ Ishod nije "a priori" poznat
- ❖ Cilj je pronaći "skrivene" poveznice

Učenje s potkrepljenjem

- ❖ Interakcija s okolinom => povratna informacija
- ❖ Maksimiziranje finalne "nagrade"

Strojno učenje u fizici materijala

Prvi slučaj Smith (1999)

Generalizirali Behler i Parinello (2007) - primjer silicija

Cilj je i dalje isti - modelirati PES

Proces sličan pristupu "polja sile", no bez pretpostavki o interakciji

Mreža sama "uči" fiziku sustava – prednost i nedostatak

Koliko podataka je dovoljno?

Precizni računi (DFT)

❖ Velika točnost podataka

❖ Problem količine

Grublje aproksimacije (force fields)

❖ Lakši za generirati

❖ Podaci lošije kvalitete

Strojno učenje na podatcima različite točnosti (multi-fidelity ML)

Setovi podataka za treniranje mreže

5 setova različite veličine i točnosti

❖ PBE	52,348
❖ HSE	6030
❖ GLLB-SC	2290
❖ SCAN28	472
❖ Eksperiment	2703

Svaki set je podjeljen u omjeru

- ❖ 80% treniranje mreže
- ❖ 10% validacija
- ❖ 10% testiranje

Neuralne mreže

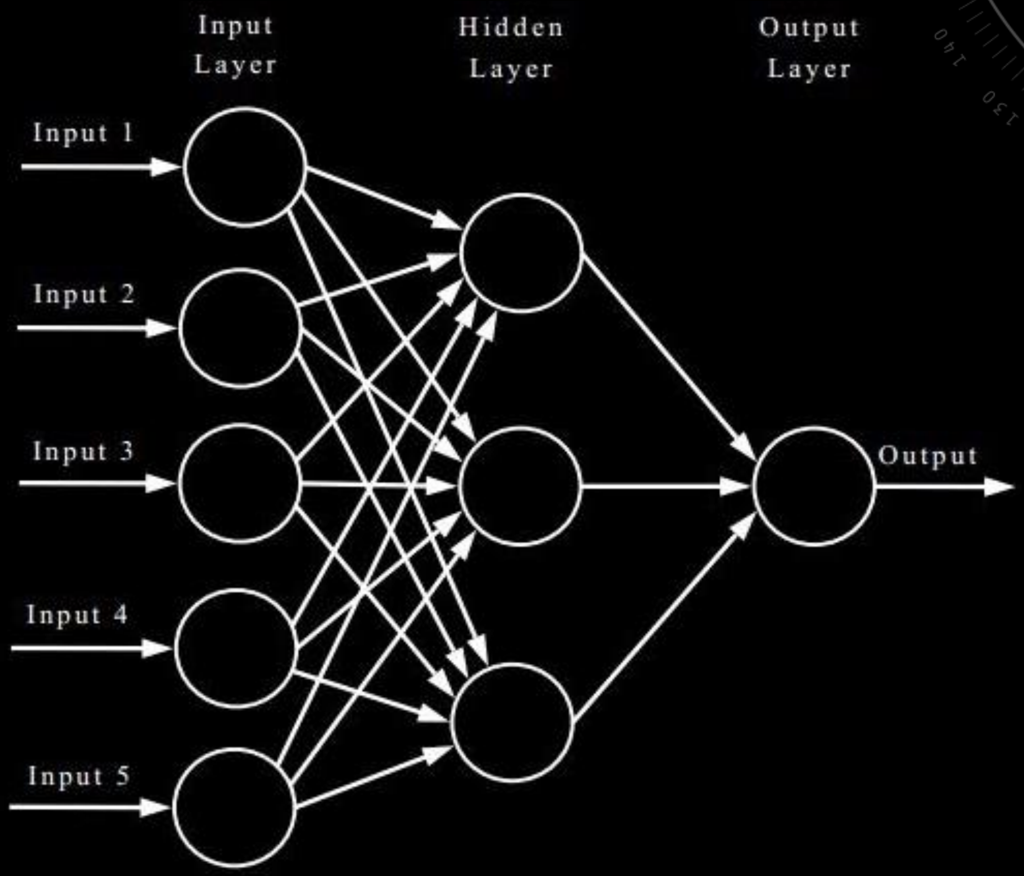
Inspirirane radom mozga – neuroni

Treniranje mreže se odvija regulacijom "težina" neurona

Igru loss funkcije ima srednja apsolutna greška (MAE)

Nelinearna aktivacijska funkcija

$$\ln(e^x + 1) - \ln(2)$$



Konstrukcija mreže grafova materijala

Strukturu prikazujemo neusmjerenim grafovima

- Vrhovi predstavljaju atome
- Bridovi predstavljaju veze

Elemente prikazujemo vektorima u apstraktnom prostoru

- Minimalna dimenzija prostora = broj različitih elemenata
- Dodavanje dimenzija => više parametara mreže
- Najbolji model pri $\mathbb{R}^{16}$

Gaussove ekspanzije udaljenosti

m-ti član u razvoju *k*-te veze

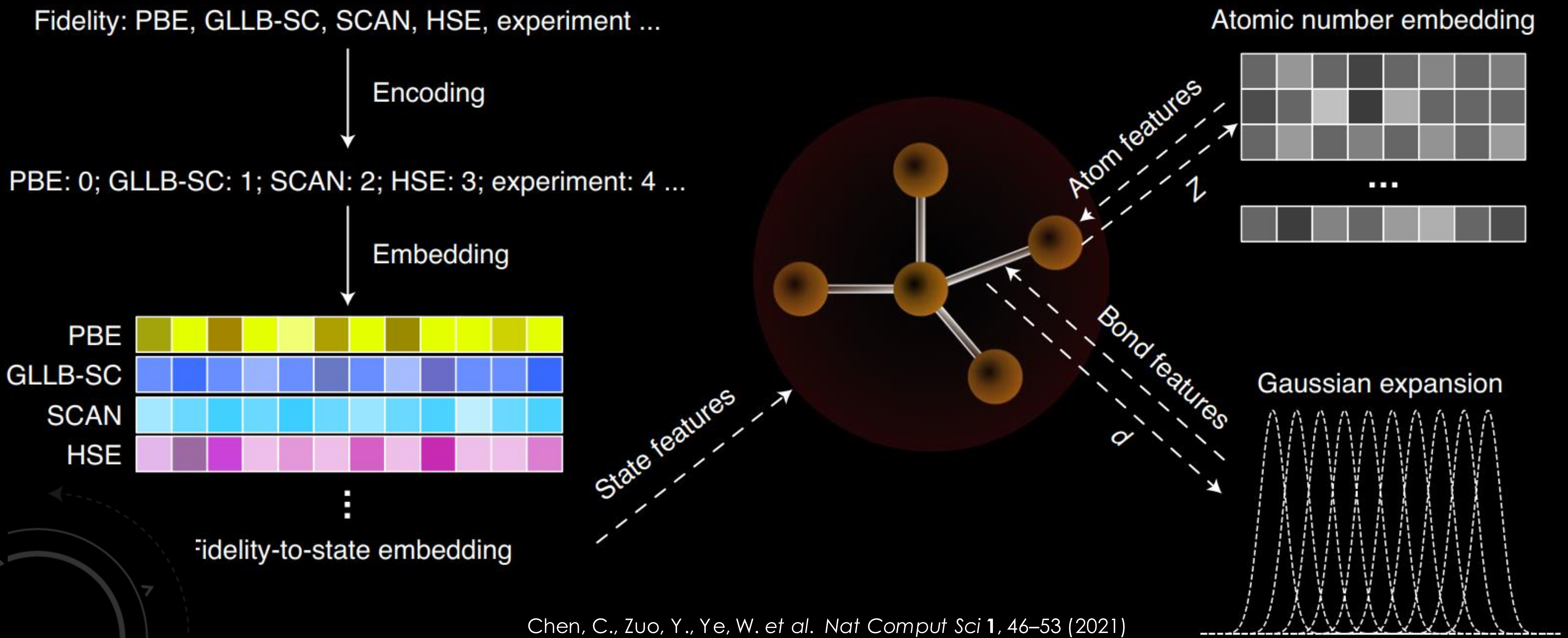
$$e_{k,m} = \exp - \frac{(d_k - \mu_m)^2}{\sigma}, \forall d_k \leq R_c$$

$$\mu_m = \frac{m}{n_{\mathrm{bf}} - 1} \mu_{\max}$$

Parametri u modelu

$n_{\mathrm{bf}} = 100$	broj članova u razvoju
$R_c = 5\text{Å}$	"cut-off" radius
$\mu_{\max} = 6\text{Å}$	

Shematski prikaz zapisivanja atributa struktura



Chen, C., Zuo, Y., Ye, W. *et al.* *Nat Comput Sci* **1**, 46–53 (2021)

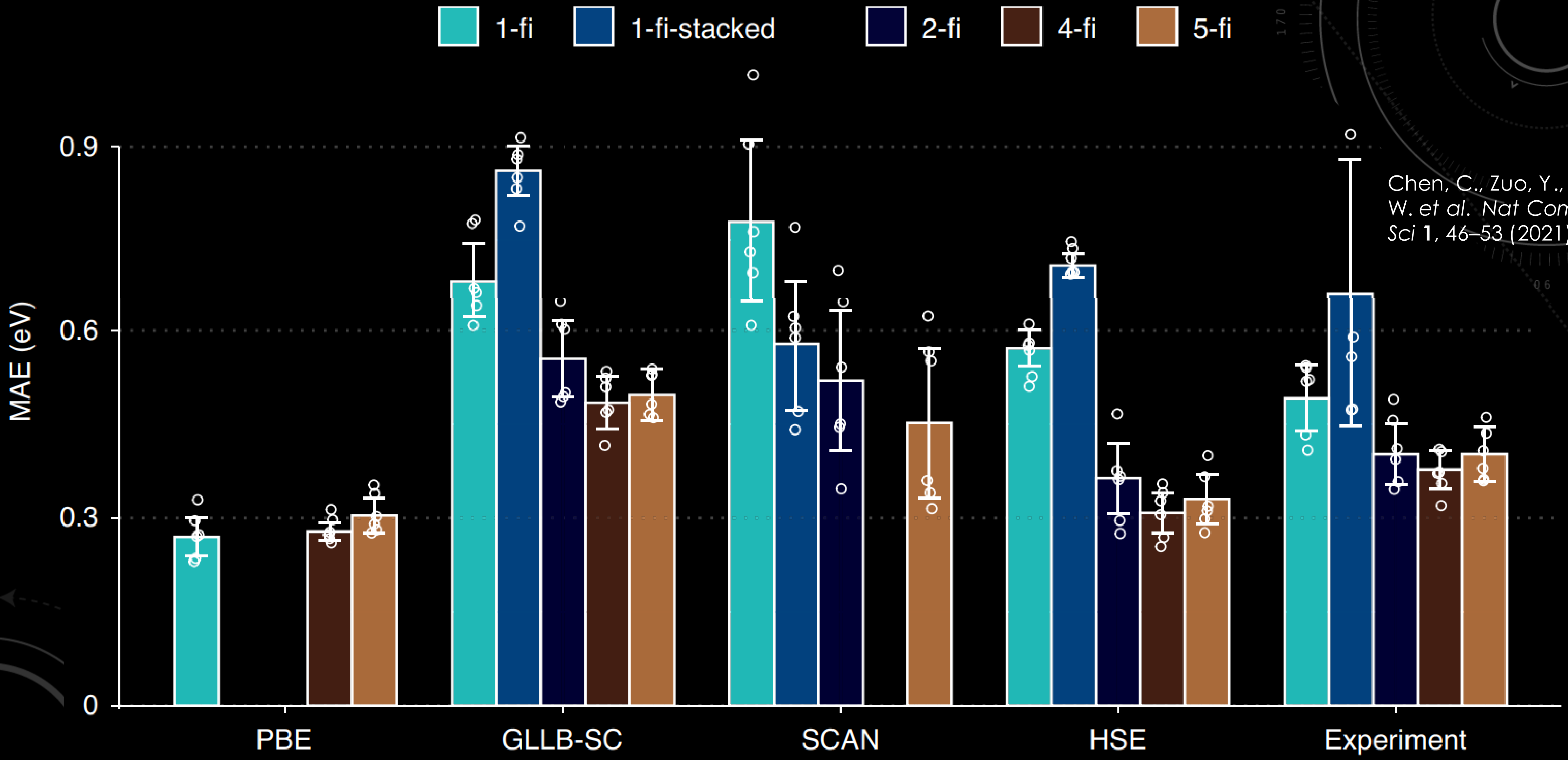
Propagiranje atributa (funkcije ažuriranja)

Veze $$\mathbf{e}'_k = \phi_e\left(\mathbf{v}_{s_k} \oplus \mathbf{v}_{r_k} \oplus \mathbf{e}_k \oplus \mathbf{u}\right)$$

Atomi $$\mathbf{v}'_i = \phi_\nu\left(\bar{\mathbf{v}}_i^e \oplus \mathbf{v}_i \oplus \mathbf{u}\right)$$

Stanja $$\mathbf{v}' = \phi_u\left(\bar{\mathbf{u}}^e \oplus \bar{\mathbf{u}}^\nu \oplus \mathbf{u}\right)$$

Rezultati



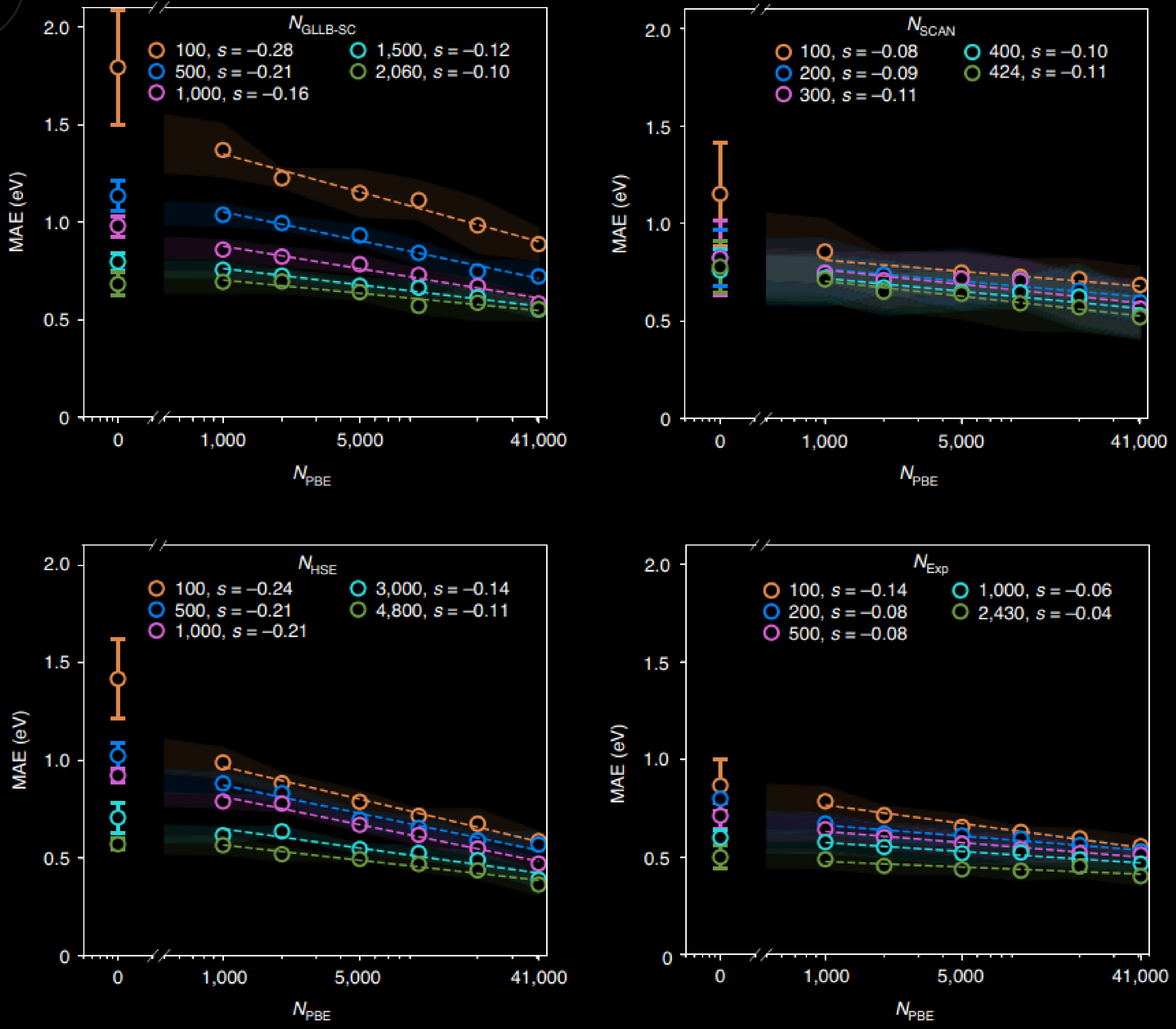
Chen, C., Zuo, Y., Ye, W. *et al.* *Nat Comput Sci* **1**, 46–53 (2021)

Ovisnost MAE o količini podataka za 2-fi modele

Set podataka više točnosti + PBE

Smanjenje MAE dodavanjem struktura bilo kojeg seta

Parametar s predstavlja nagib fitanih pravaca



Chen, C., Zuo, Y., Ye, W. *et al.* *Nat Comput Sci* **1**, 46–53 (2021)

Zaključak

Veliki sustavi predstavljaju problem za "ab initio" metode, rješenje tražimo koristeći se neuralnim mrežama

Združeno korištenje podataka različite točnosti smanjilo je MAE u rasponu od 22% do 45% u odnosu na korištenje pojedinačnih setova

Korištenjem i samo velikog seta nepreciznijih podataka (PBE) uz bilo koji od setova veće točnosti već vidno smanjuje pogreške modela