

Predição de propriedades de materiais a partir de GGNN

Otaviano da Cruz Neto

28 de setembro de 2021

Resumo

Atualmente, a utilização técnicas de aprendizado de máquina vem sendo amplamente em diversas áreas do conhecimento. Na Ciência de Materiais, as redes neurais compõem uma infinidade de aplicações, incluindo a descoberta de novas drogas, predição de propriedades, etc. Além disso, esses modelos também introduzem substitutos a métodos de DFT *ab initio*. Neste contexto, este trabalho irá fazer uso da *Gated Graph Neural Network* - GGNN para prever o gap entre a banda de valência e a banda de condução (*band gap*) de um determinado material. Os materiais serão retirados da base de dados nomeada *Quantum-Machine 9* - QM9 que contém informações (posição dos átomos, forças, número atômico, etc) e propriedades calculadas via *ab initio* de 134 mil moléculas orgânicas. Por fim, após a realização das fases de treinamento, teste e validação da rede, iremos comparar os resultados obtidos neste trabalho com os descritos no artigo base e, assim, poder sugerir possíveis alterações para trabalhos futuros.