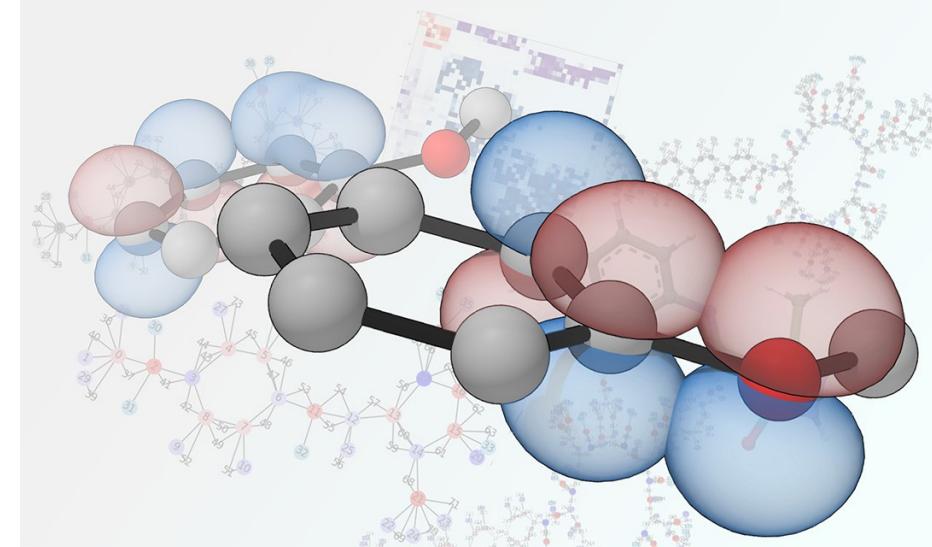


# Aula Bônus Machine Learning FF com MACE

Ref: Artigos Citados

**Prof. Elvis Soares**  
[elvis@peq.coppe.ufrj.br](mailto:elvis@peq.coppe.ufrj.br)



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$
$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

# MACE (Atomic Cluster Expansion)

- Prediz interações atômicas de muitos corpos com alta precisão.
- Gera campos de força altamente precisos para uso em simulações de dinâmica molecular.
- Utiliza passagem de mensagens equivariantes de ordem superior.
- Realiza previsões rápidas e eficientes.
- Disponibiliza modelos fundamentais prontos para diversas aplicações.
- Oferece interface com LAMMPS e OpenMM para simulações de dinâmica molecular.

Arquitetura em PyTorch

## ACEsuit/mace

MACE - Fast and accurate machine learning interatomic potentials with higher order equivariant message passing.



45  
Contributors

62  
Issues

366  
Discussions

957  
Stars

355  
Forks



<https://mace-docs.readthedocs.io/en/latest/index.html>

Batatia, Illyes, et al. "MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields." Advances in neural information processing systems 35 (2022): 11423-11436.

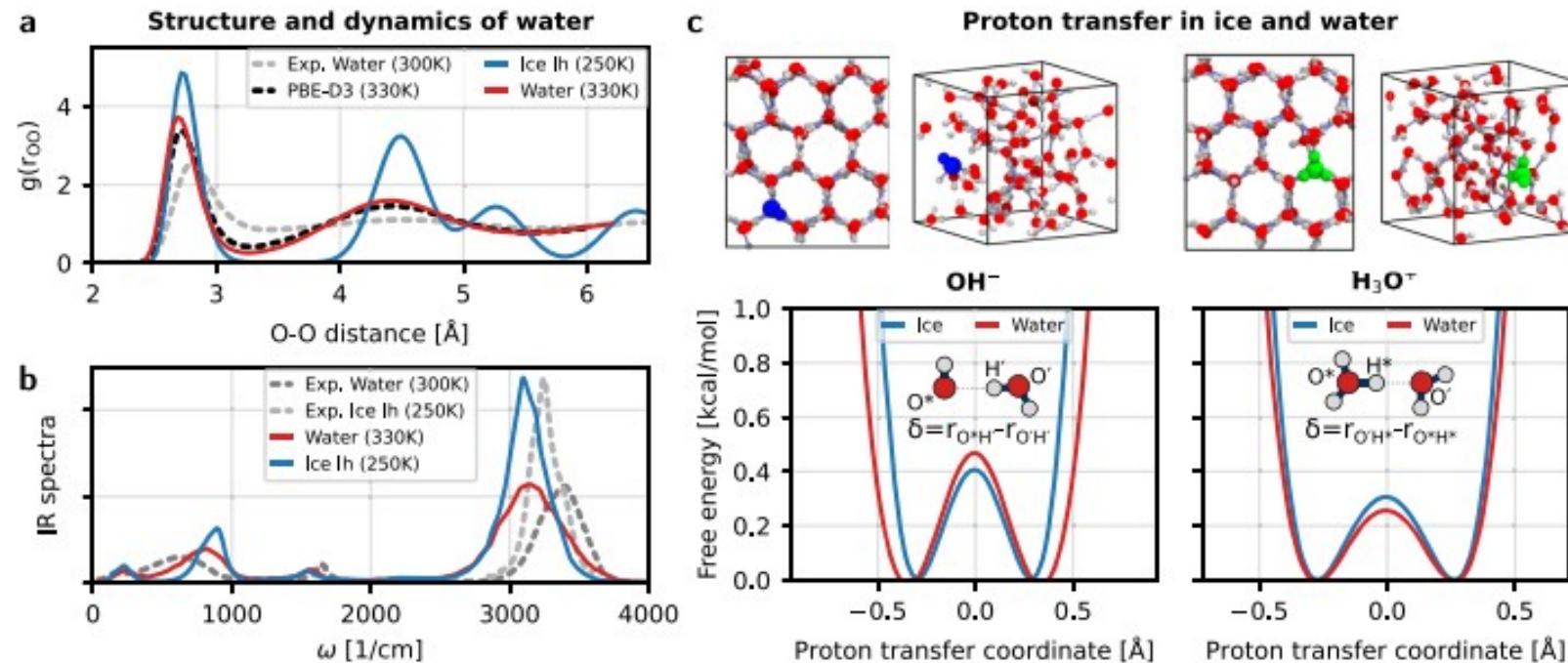
# Foundation Models

## MACE-MP-0

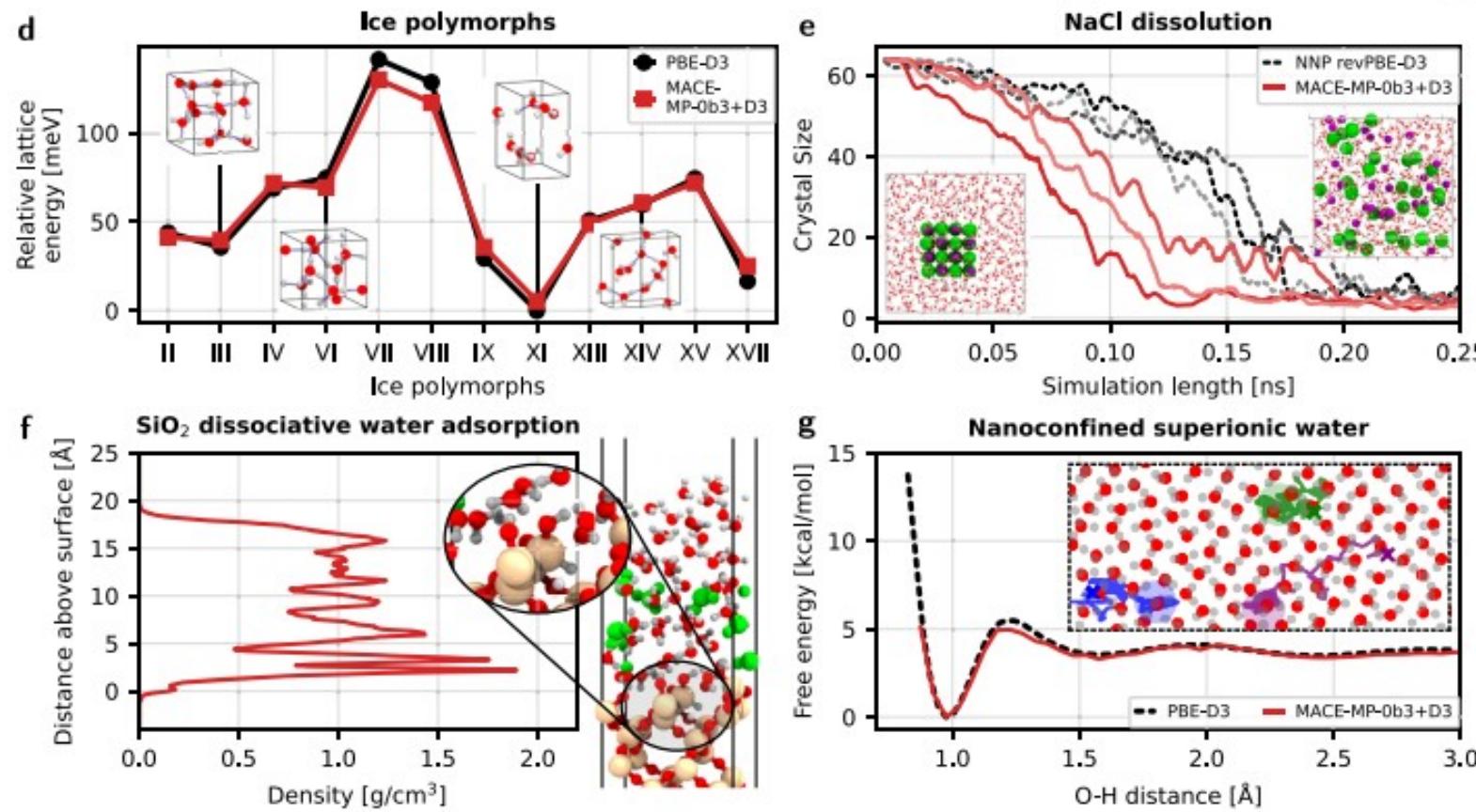
- Treinado com 1.5M de trajetórias Mptrj
- *Cálculos Ab Initio:* DFT +D3
- Estruturas cristalinas inorgânicas e componentes moleculares
- Todos elementos da tabela periódica

Model Name	Elements Covered	Training Dataset	Level of Theory
MACE-MP-0	89	MPTraj	DFT (PBE+U)
MACE-MPA-0	89	MPTraj + sAlex	DFT (PBE+U)
MACE-OMAT-0	89	OMAT	DFT (PBE+U) VASP 54
MACE-MATPES-0	89	MATPES	PBE/R2SCAN
MACE-OFF23	10	SPICE v1	DFT (wB97M+D3)
MACE-MH-1/0	89	OMAT/OMOL/OC20/MATPES	DFT (PBE/R2SCAN/wB

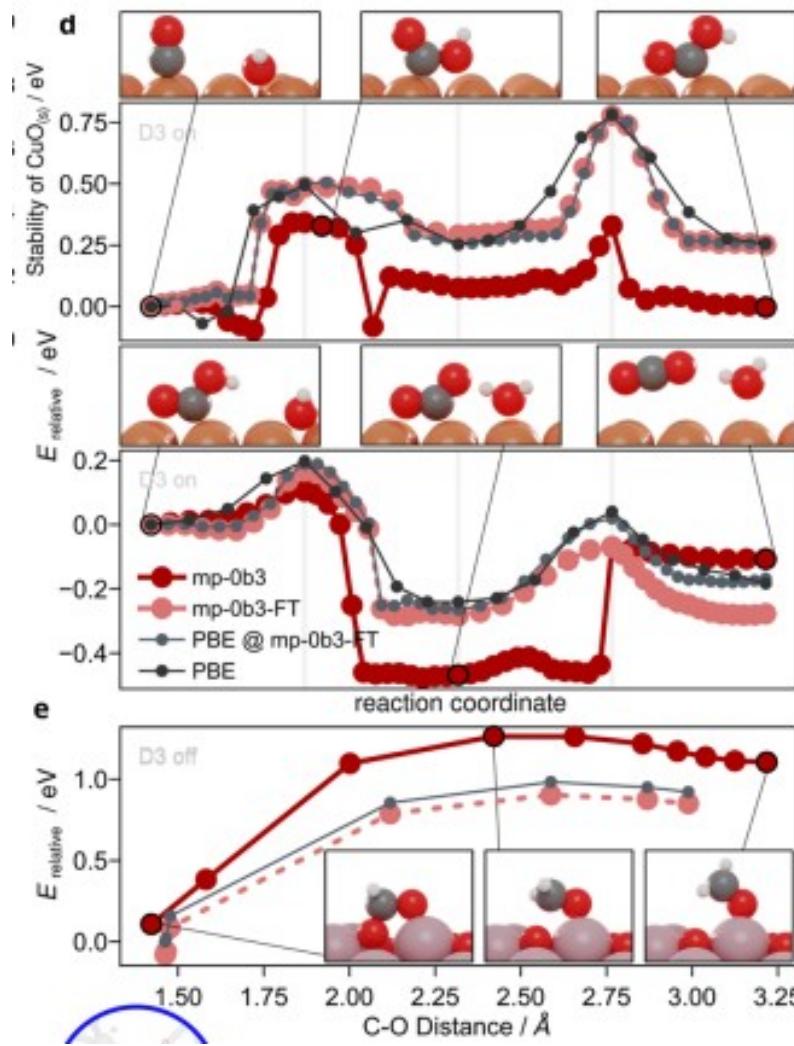
# Aplicação em Sistemas Aquosos



# Aplicação em Sistemas Aquosos



# Aplicação em Catálise



# Fine-Tuning

