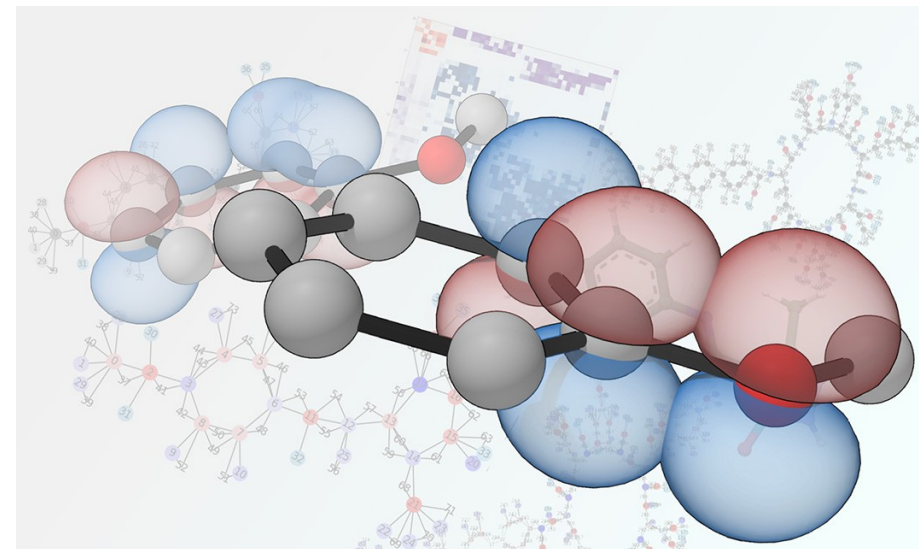


Aula Bônus Machine Learning FF com MACE

Ref: Artigos Citados

Prof. Elvis Soares
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, Ilyes, 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.

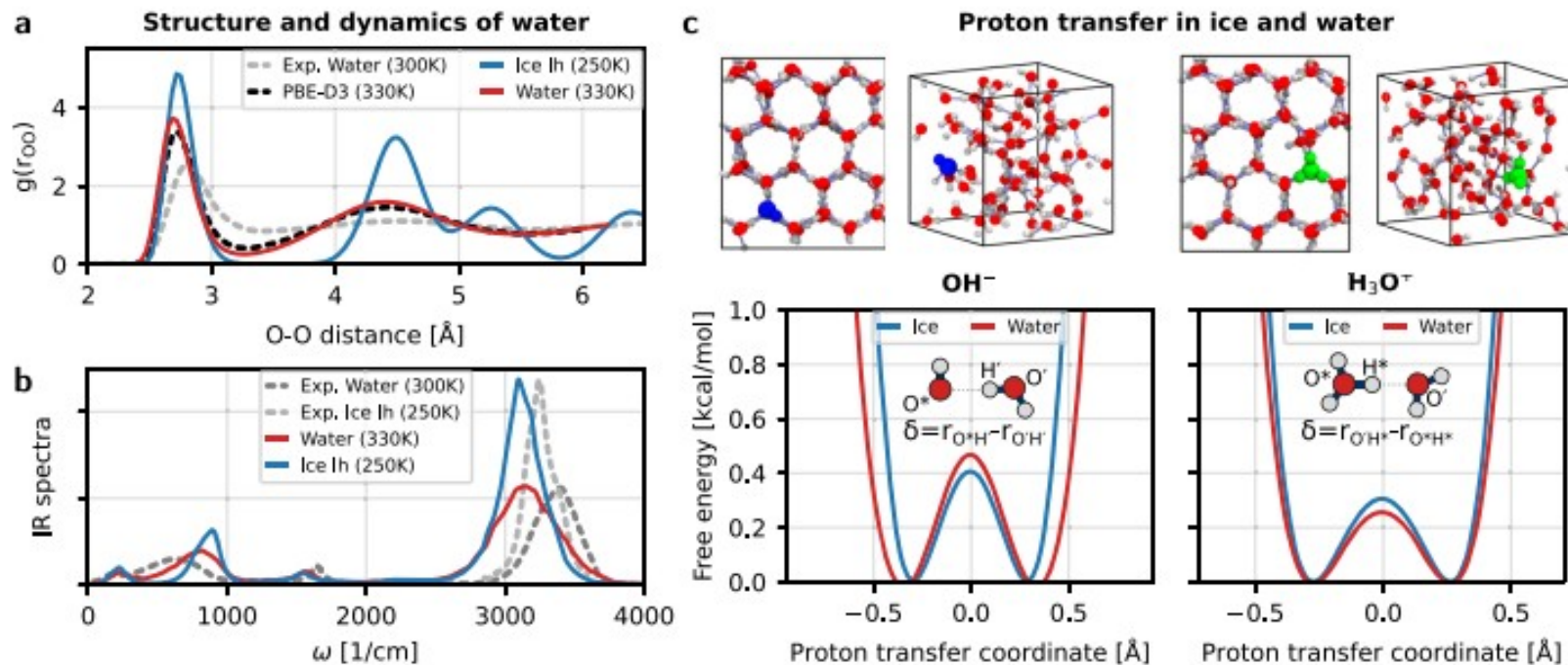
Foundation Models

MACE-MP-0

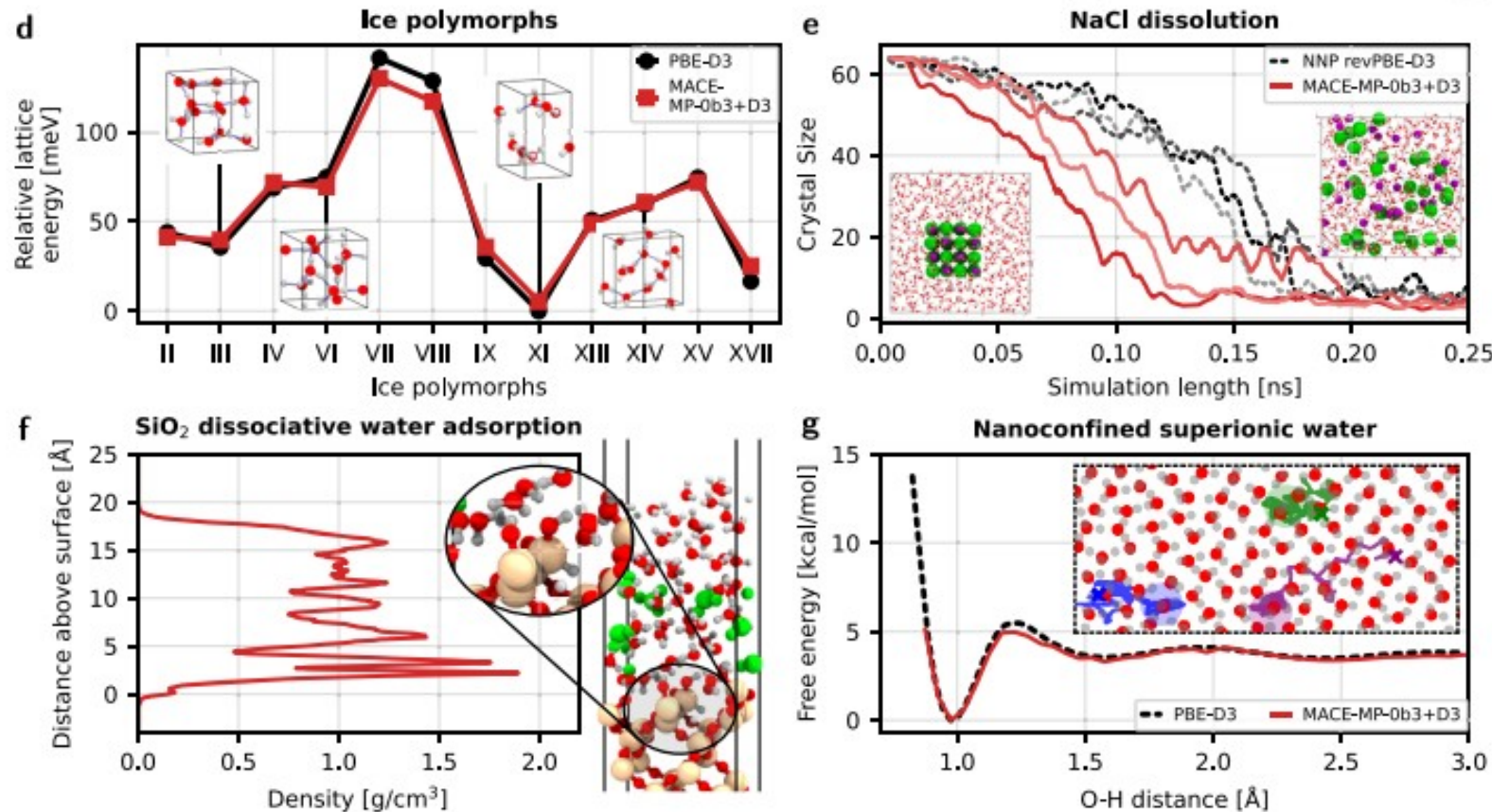
- Treinado com 1.5M de trajetórias Mptrj
- *Cálculos Ab Initio*: DFT +D3
- Estruturas cristalinas inorgânicas e componentes moleculares
- Todos elementos da tabela periódica

Model Name	Elements Covered	Training Dataset	Level of Theory
MACE-MP-0	89	MPTTrj	DFT (PBE+U)
MACE-MPA-0	89	MPTTrj + 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

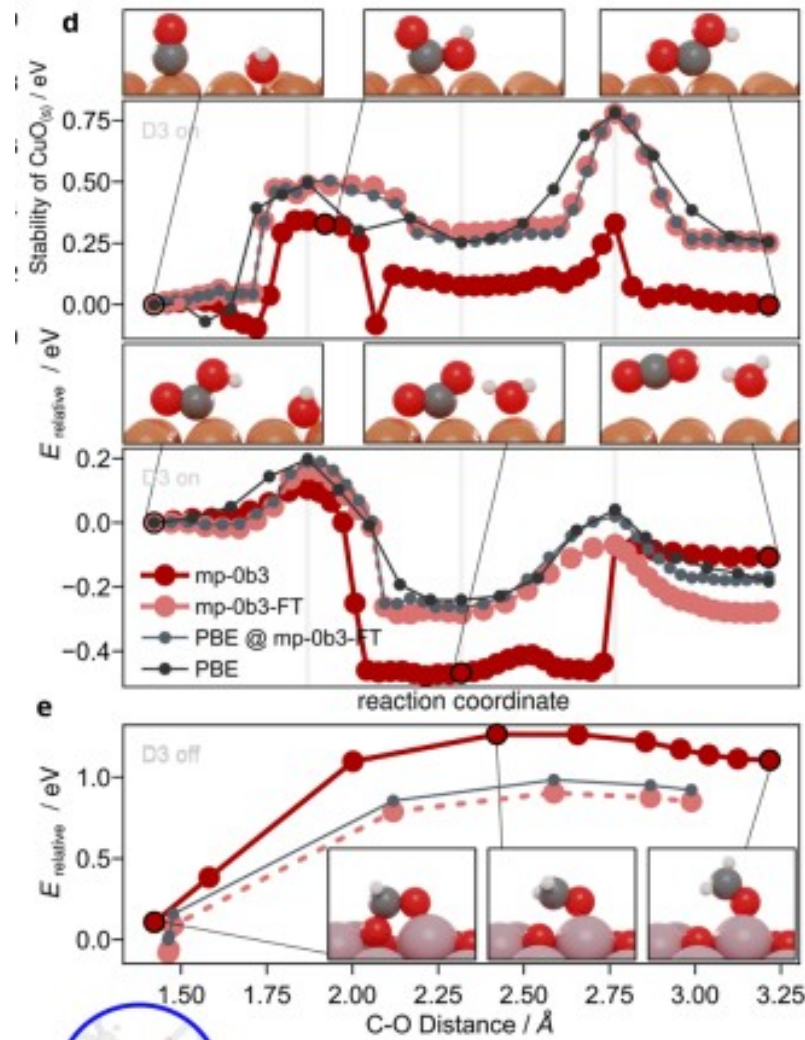
Aplicação em Sistemas Aquosos



Aplicação em Sistemas Aquosos



Aplicação em Catálise



Fine-Tuning

