

Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an Accurate and Interpretable Prediction of Material Properties

Abst.

- Crystalline materials를 학습하기 위해 machine learning methods를 사용하려고 하며, 직접 feature vector를 구축하거나, 복잡한 변환을 거쳐주어야한다. 이 논문에서는 CGCNN(crystal graph convolutional neural networks) framework를 소개하여 모델이 직접 crystal에서 atom들의 연결구조로 부터 material properties를 학습할 수 있는 방법을 소개한다.
- 논문에서 8가지 다른 crystals 특성들에 대하여 계산된 [DFT](#)를 예측하는 문제에서 높은 정확도를 보였다.
- 뿐만아니라 해당 프레임워크는 local chemical enviroments에서 global properties까지의 contibutions를 추출하기 때문에 interpretable하다고 주장한다.

Intro.

- 위에서 언급했듯이 crystal 구조를 다루기 위해선 크게 두 가지 방법이 있는데 하나는 "manually constructing fixed-length feature vectors using simple material properties" 이고 다른 하나는 "designing symmetry-invariant transformations of atom coordinates" 이다. 전자의 방법은 case-by-case design이 필요하고, 후자는 복잡한 transformation에 의한 결과로써 모델을 해석하기 어려움이 있다.
- CGCNN은 8가지 다른 properties에 대하여 DFT와 비교했을때 DFT의 계산에 근접한 계산이 가능하였다.
- 또한 전체 에너지에서 perovskite 구조안에 있는 각 site 별 energy를 추출함으로써 CGCNN의 설명가능성을 보였다.(?)
- Main idea는 atomic information과 atom 사이의 bonding interactions를 인코딩하여 crystal structure를 represent하는 것이다.

CGCNN

- 기본 형태의 convolution function

$$v_i^{(t+1)} = g[(\sum_{j,k} v_j^{(t)} \oplus u_{(i,j)_k}) W_c^{(t)} + v_i^{(t)} W_s^{(t)} + b^{(t)}]$$

- v 는 node vector, u 는 edge vector이다. \oplus 는 concatenation이다. 이때, $W_c^{(t)}$ 는 i 노드의 모든 이웃노드에 공유되는 weight 이다. 이는 i node(atom) 과 이웃 노드 사이의 interaction strength를 반영하지 못 한다. 따라서 다음과 같이 변형된 function을 정의한다.
- $z_{(i,j)_k}^{(t)} = v_i^{(t)} \oplus v_j^{(t)} \oplus u_{(i,j)_k}$ 로 정의한다. 여기서 k 는 하나의 nodes pair 가 k 개의 bond를 가질 수 있기 때문이다.

$$v_i^{(t)} = v_i^{(t)} + \sum_{j,k} \sigma(z_{(i,j)_k}^{(t)} W_f^{(t)} + b_f^{(t)}) \odot g(z_{(i,j)_k}^{(t)} W_s^{(t)} + b_s^{(t)})$$

- \odot 은 element-wise multiplicaiton, σ 는 학습가능한 weight matrix이다. 이웃 사이의 관계를 학습한다. g 는 non-linear activation funciton이다.