

Konstruksjon av høydimensjonale nevralt nettverk-potensialer for molekylærdynamikk

John-Anders Stende

Fysisk institutt
Universitetet i Oslo

Masterpresentasjon, oktober 2017

Table of Contents

Molekylærdynamikk

Nevrale nettverk

Nevralt nettverk-potensial

LAMMPS og TensorFlow

Konstruksjon av nevralt nettverk-potensial (NNP)

NNP for Si

Hva er molekylærdynamikk?

- ▶ Numerisk metode for å simulere atomers og molekylers bevegelser i gasser, væsker og faste stoffer.
- ▶ Virtuelt eksperiment.

Dynamikk

- ▶ Partiklenes interaksjoner styrer dynamikken.
- ▶ Interaksjonene bestemmes av et kraftfelt \mathbf{F} :

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r})$$

- ▶ Potensiell energiflate / potensial):

$$V(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

- ▶ $V(\mathbf{r})$ inneholder all fysikken.

Ab initio molekylærdynamikk

Løse Schrödinger-likningen ved hvert tidssteg.

Klassisk molekylærdynamikk

Bruke en predefinert analytisk funksjon.

Klassisk potensial

$$V(\mathbf{r}) \approx \sum_i^N V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j}^N V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i,j,k}^N V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots$$

Hvordan bør leddene se ut?

Eksperimenter / kvantemekanikk

"Fysisk" strategi:

1. Starte med en funksjonsform med noen parametre.
2. Bestemme parametre fra eksperimentelle data.

"Matematisk" strategi:

1. Produsere kvantemekaniske data.
2. Tilpasse en generell funksjonsform til dataene.

Interpolere datasett

- ▶ Spliner
- ▶ Minste kvadraters metode
- ▶ Maskinlæring

Table of Contents

Molekylærdynamikk

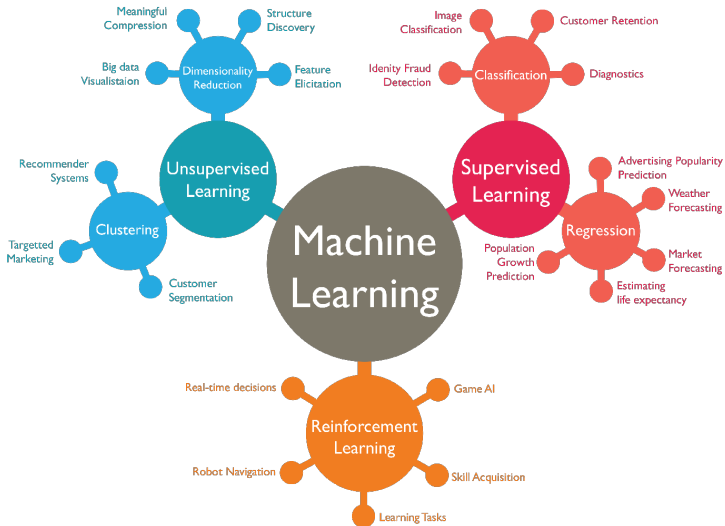
Nevrale nettverk

Nevralt nettverk-potensial

LAMMPS og TensorFlow

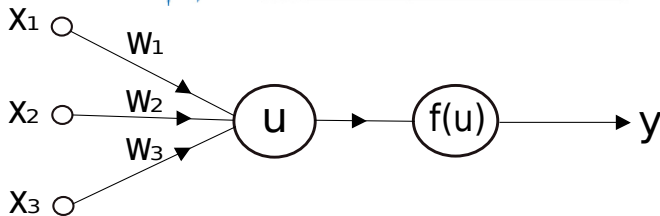
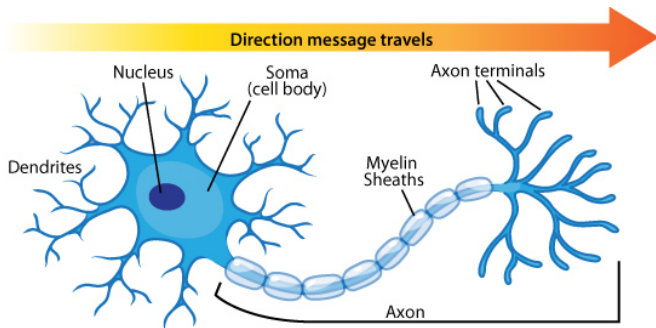
Konstruksjon av nevralt nettverk-potensial (NNP)

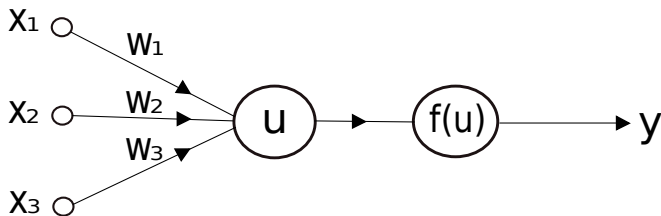
NNP for Si



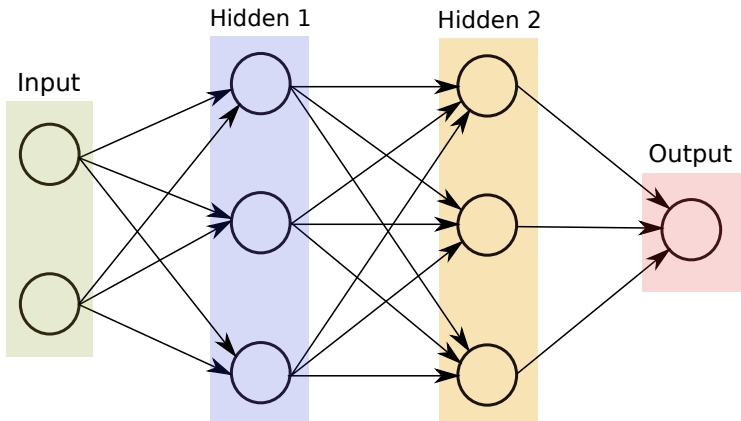
Kunstige nevrale nettverk

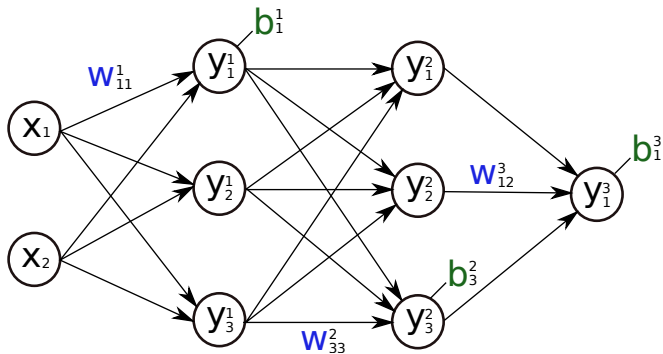
- ▶ Etterlikne en biologisk hjerne
- ▶ Nettverk av matematiske nevroner





$$y = f \left(\sum_{i=1}^n w_i x_i + b_i \right) = f(u)$$

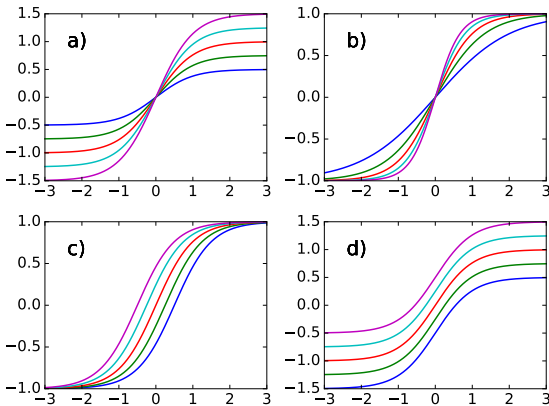




$$y_i^1 = f_1(u_i^1) = f_1 \left(\sum_{j=1}^2 w_{ij}^1 x_j + b_i^1 \right)$$

$$y_1^3 = f_3 \left[\sum_{j=1}^3 w_{1j}^3 f_2 \left(\sum_{k=1}^3 w_{jk}^2 f_1 \left(\sum_{m=1}^2 w_{km}^1 x_m + b_k^1 \right) + b_j^2 \right) + b_1^3 \right]$$

$$h(x) = c_1 f(c_2 x + c_3) + c_4$$



Matrix notation

$$y_i^2 = f_2 \left(\sum_{j=1}^3 w_{ij}^2 y_j^1 + b_i^2 \right)$$

$$\mathbf{y}_2 = f_2(\mathbf{W}_2 \mathbf{y}_1 + \mathbf{b}_2) = f_2 \left(\begin{bmatrix} w_{11}^2 & w_{12}^2 & w_{13}^2 \\ w_{21}^2 & w_{22}^2 & w_{23}^2 \\ w_{31}^2 & w_{32}^2 & w_{33}^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1^1 \\ y_2^1 \\ y_3^1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1^2 \\ b_2^2 \\ b_3^2 \end{bmatrix} \right)$$

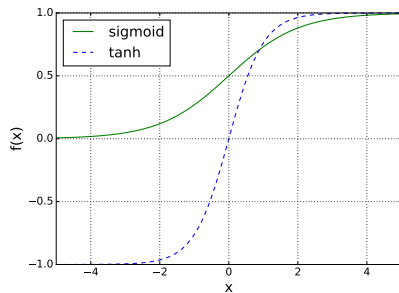
Activation functions

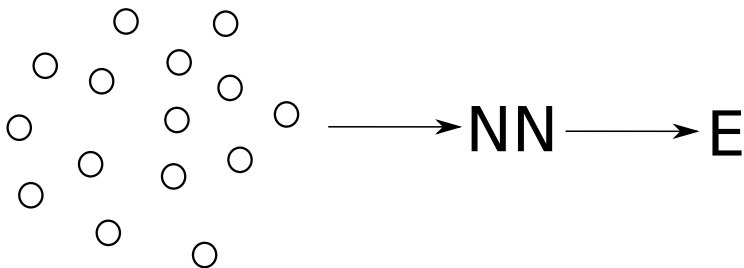
The sigmoid

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

and the hyperbolic tangent

$$f(x) = \tanh(x)$$





Regresjon med nevralt nettverk

- ▶ Regresjon: Interpolere datasett $X \rightarrow Y$
- ▶ X : inputdata, Y : outputdata, X_{i*} : treningseksempel.
- ▶ Trening: Iterativt minimere feilen til et sett med kjente energier.

Feilen defineres ved en cost-funksjon:

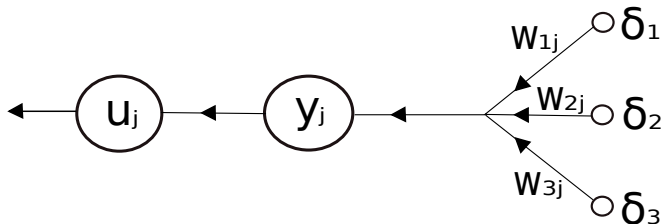
$$\Gamma = \Gamma(\{\mathbf{W}_I\}, \{\mathbf{b}_I\}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (Y_i - y_i)^2$$

Optimering med gradient descent:

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \gamma \nabla_{\theta_k} \Gamma(\theta)$$

Mange forskjellige måter å justere γ på.

Hvordan finne gradienten av nettet?



Backpropagation

1. Sender hvert treningsseksempel gjennom nettet.
2. Output (energi) sammenliknes med kjent energi.
3. Feilen propageres *bakover* ved kjerneregelen og vektene justeres.

Table of Contents

Molekylærdynamikk

Nevrale nettverk

Nevralt nettverk-potensial

LAMMPS og TensorFlow

Konstruksjon av nevralt nettverk-potensial (NNP)

NNP for Si

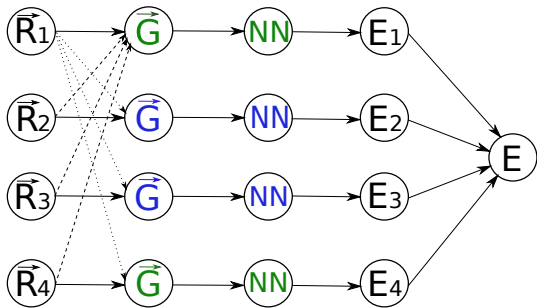
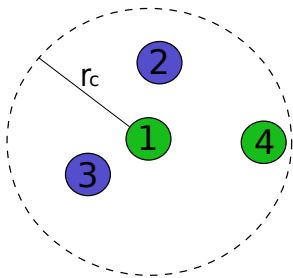
Flere muligheter

- ▶ Et eller flere nettverk?
- ▶ Hvordan representere energien?

Behler-Parrinello-metoden

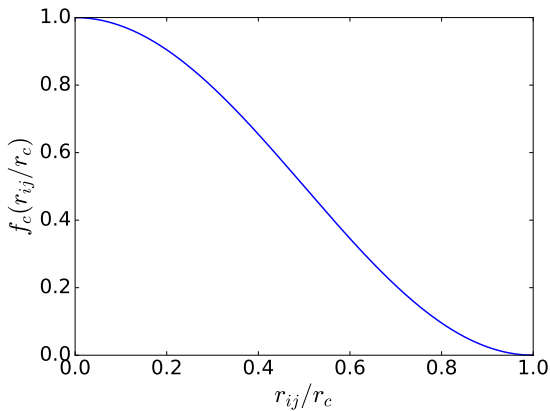
$$E = \sum_{i=1}^N E_i$$

- ▶ Atomsentrert: Hver atomenergi E_i avhenger av alle naboatomer opp til en cutoff r_c .
- ▶ Hvert atom har et eget nettverk og et sett av symmetrifunksjoner som beskriver cutoff-kulen.
- ▶ Hver atomtype har identiske nettverk og symmetryfunksjonssett.



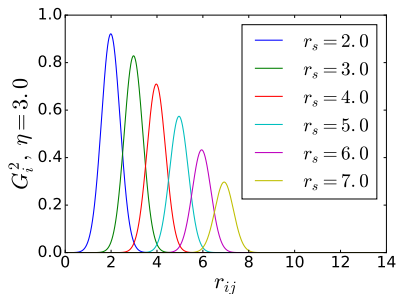
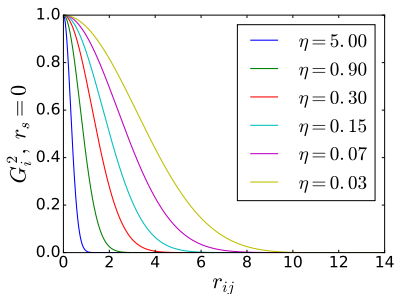
Cutoff-funksjon

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 0.5 \left[\cos \left(\frac{\pi r_{ij}}{r_c} \right) + 1 \right], & r_{ij} \leq r_c \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases}$$



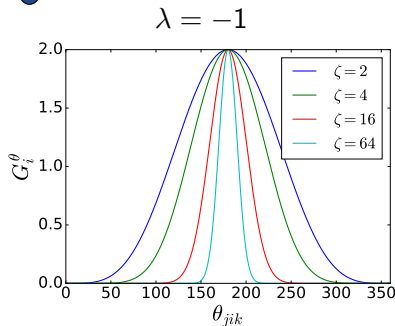
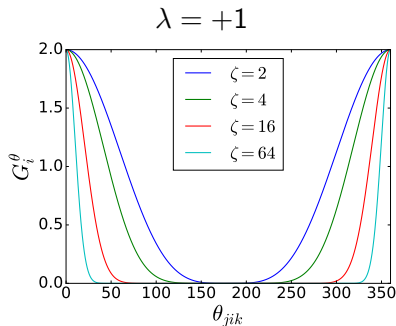
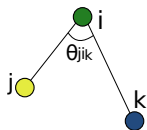
Radiell symmetrifunksjon

$$G_i^2 = \sum_{j=1}^N \exp[-\eta(r_{ij} - r_s)^2] f_c(r_{ij})$$



Angulær symmetrifunksjon

$$G_i^5 = 2^{1-\zeta} \sum_{j \neq i} \sum_{k > j} \left[(1 + \lambda \cos \theta_{jik})^\zeta \exp(-\eta(r_{ij}^2 + r_{ik}^2)) f_c(r_{ij}) f_c(r_{ik}) \right]$$



$$E_i = \text{NN}_e[\mathbf{G}_e(\mathbf{r}_{ij})]$$

$$F_{i,x} = - \sum_{j=1}^{N_i+1} \frac{\partial E_j}{\partial x} = - \sum_{j=1}^{N_i+1} \sum_{s=1}^{M_j} \frac{\partial E_j}{\partial G_{j,s}} \frac{\partial G_{j,s}}{\partial x}$$

Table of Contents

Molekylærdynamikk

Nevrale nettverk

Nevralt nettverk-potensial

LAMMPS og TensorFlow

Konstruksjon av nevralt nettverk-potensial (NNP)

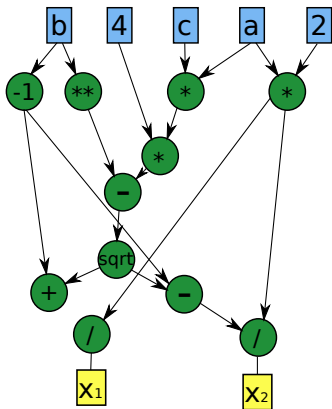
NNP for Si

LAMMPS

- ▶ Simuleringspakke for klassisk molekylærdynamikk utviklet ved Sandia National Laboratories.
- ▶ Kjøres ved inputscripts med egen syntaks.
- ▶ Vi har utvidet med samplingsalgoritme og nevral nettverk-potensial.

TensorFlow

- ▶ Maskinlæringspakke utviklet av Google.
- ▶ Setter opp nevrale nettverk som data flow-grafer (DFG).
- ▶ DFG: En graf bestående av *noder* som er forbundet av *kanter* med retning.
- ▶ Noder er matematiske operasjoner, kanter er tensorer.



$$ax^2 + bx + c = 0$$

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

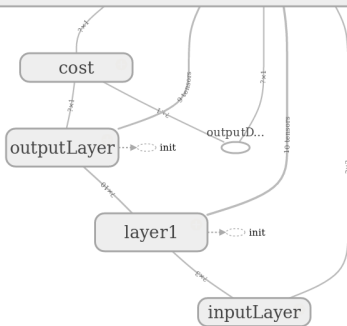
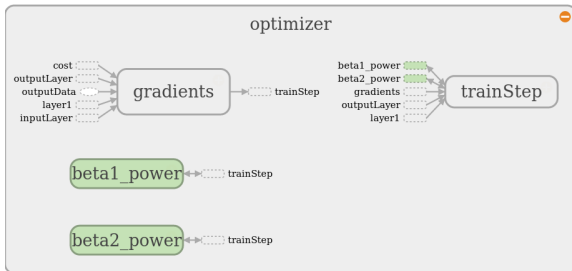


Table of Contents

Molekylærdynamikk

Nevrale nettverk

Nevralt nettverk-potensial

LAMMPS og TensorFlow

Konstruksjon av nevralt nettverk-potensial (NNP)

NNP for Si

1. Generere treningsdata som er relevant for applikasjonen av NNP.
2. Trene et nevralt nettverk for å tilpasse en funksjon til dataene.
3. Bruke det trente nettverket som et analytisk potensial i molekylærdynamikksimuleringer.

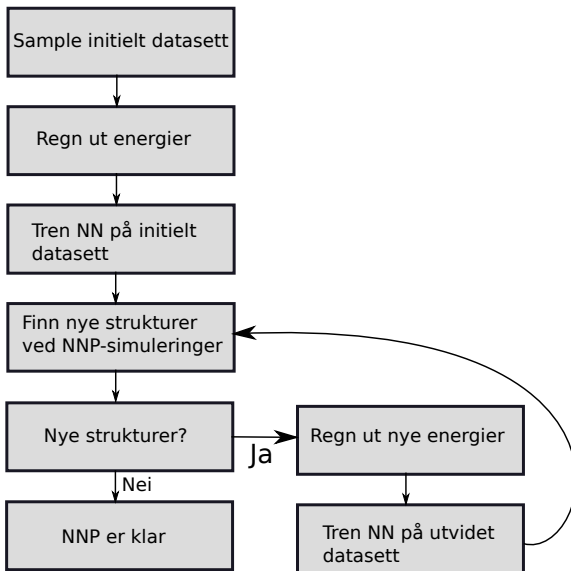


Table of Contents

Molekylærdynamikk

Nevrale nettverk

Nevralt nettverk-potensial

LAMMPS og TensorFlow

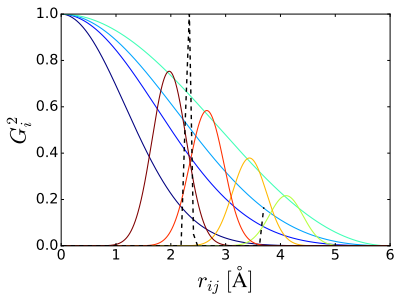
Konstruksjon av nevralt nettverk-potensial (NNP)

NNP for Si

Initiell sampling

- ▶ Stillinger-Weber.
- ▶ $T \in [0, 500]$ K.
- ▶ Konfigurasjoner og energies samples ved samplingsalgoritme.

Radielle



Angulære

