

Konstruksjon av høydimensjonale nevralt nettverk-potensialer for molekylærdynamikk

John-Anders Stende

Fysisk institutt
Universitetet i Oslo

Masterpresentasjon, oktober 2017

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
- ▶ Kunstige nevrale nettverk

Kunstige nevrle nettverk