# Informe Progrés 1

# INTRODUCCIÓ:

En aquest informe de progressió, s'abordaran els objectius que s'han desenvolupat durant les dues primeres fases del projecte, la fase de formació i la fase d'avaluació. Es durà a terme una avaluació de l'eficàcia en l'assoliment dels objectius, així com del contingut treballat fins al moment. Finalment, es proporcionarà un apartat de conclusions que inclourà suggeriments per a possibles millores en la pròxima etapa del projecte. Cal destacar que en aquest informe, l'objectiu principal serà descriure i detallar les tasques i activitats desenvolupades durant les dues fases del projecte, sense abordar de forma exhaustiva la presentació dels resultats concrets.

# Assoliments:

En aquest apartat es presenten els objectius treballats durant les dues primeres fases del projecte, així com els mitjans i les tasques emprades per a la seva consecució. S'ha optat per representar aquesta informació de forma clara i concisa mitjançant una taula resum, que permeti visualitzar de manera ràpida i efectiva els assoliments del projecte fins al moment.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **FASE DE FORMACIÓ** | | | |
| Objectiu | Metodologies empleades | | Resultats |
| O1 | Per a l'assoliment del primer objectiu, que consistia en desenvolupar un coneixement profund dels fonaments teòrics i pràctics de les XN i la simulació de DM, s'han emprat diverses metodologies.  En el cas de la simulació de DM, s'han realitzat diverses tutories amb el meu tutor extern Jordi, on hem discutit a fons el tema i he pogut resoldre dubtes i aprofundir en conceptes clau. A més a més, s'ha realitzat recerca pròpia, llegint treballs que em van ser enviats pel tutor i també articles, vídeos i altres fonts de documentació que aborden aquest tema en profunditat.  Per a l'assoliment del coneixement en XN s'han emprat diverses vies. D'una banda, les assignatures relacionades amb el tema, com ara APC, han estat fonamentals per a la comprensió dels fonaments teòrics. D'altra banda, s'han realitzat reunions i trucades amb estudiants de carreres més especialitzades en el tema, com ara IA o MatCAD, que han aportat una perspectiva diferent i enriquidora. Finalment, s'ha emprat la recerca i la lectura de treballs que tracten els temes que s'han anat trobant durant la lectura dels treballs de DM. | | S'ha aconseguit desenvolupar un coneixement profund dels fonaments teòrics i pràctics de les Xarxes Neuronals i la simulació de DM. Això ha permès iniciar el treball del projecte amb més facilitat, així com entendre millor els objectius a aconseguir en les fases posteriors. Encara que no es disposi de resultats concrets a presentar per aquest objectiu, s'ha realitzat un informe inicial que mostra l'estat actual del projecte i les accions previstes per a la seva consecució. |
| O2 | Per al desenvolupament d'una comprensió crítica dels avantatges i les limitacions de les XN en la simulació de DM, comparant-les amb altres tècniques i abordaments existents, s'han realitzat tutories amb el tutor extern Jordi per discutir aquest tema. A més, s'han fet lectures d'articles científics i treballs relacionats que presenten comparacions entre les metodologies tradicionals i les noves que apliquen les Xarxes Neuronals. | S'ha detectat que les XN presenten avantatges significatius en l'aplicació de tècniques de DM que involucren grans quantitats de dades, ja que són capaces de processar aquestes dades de forma eficient i eficaç. També s'ha identificat que les XN són una eina útil per a l'extracció de característiques, ja que poden identificar patrons complexos que les tècniques tradicionals no poden detectar.  No obstant això, també s'ha detectat que les XN presenten algunes limitacions en la seva aplicació en DM, com ara la necessitat d'una gran quantitat de dades per al seu entrenament i la dificultat per interpretar els resultats obtinguts. Així mateix, s'ha comprovat que no sempre són la millor opció en casos en què les dades no són prou complexes o no es disposa d'una gran quantitat de mostres. | |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **FASE D'AVALUACIÓ** | | |
| Objectiu | Metodologies empleades | Resultats |
| O3.1 | Per a l'objectiu de l'estudi de les bases de dades utilitzades en els treballs més recents del camp de la DM que apliquen XN, la metodologia emprada va consistir principalment en la lectura detallada de la documentació i dels papers publicats dels treballs TorchMD[1] i SchNetPack[2]. Això va incloure una anàlisi exhaustiva dels conjunts de dades utilitzats en aquests treballs i una comparació de les seves característiques i limitacions. També es van estudiar altres fonts de informació relacionades amb les bases de dades de DM i XN per ampliar el coneixement en aquest àmbit. | Després de llegir la documentació i els papers publicats dels treballs TorchMD i SchNetPack, s'ha observat que aquests treballs fan bases de dades com ara la QM9 per a TorchMD i de nou la QM9[3] i la MD17[4] per a SchNetPack entre d’altres.  Per tant, es pot concloure que la QM9 és una base de dades amplament utilitzada en els treballs més recents de DM que apliquen XN, I serà de gran utilitat donat que facilitarà el treball a la hora de comparar els models  (Entro en mes detall sobre les bases de dades utilitzades en l’informe de el “State of the art”) |
| O3.2 | (Comparteix metodologia amb els objectius O3.1 – O3.2 i O3.3.) | En els papers publicats de s’afirma que SchNetPack proporciona dos possibles models de representació (w)ACSF (description-based) i SchNet (end-to-end). En el cas de TorchMD pren exactament aquest mateix sistema per representar els sistemes.  Donada la poca varietat de sistemes de representació s’ha realitzat recerca extra en altres treballs. En aquest cas DeePMD-kit[5] s’utilitza una combinació entre un mètode description-based i un end-to-end.  (Tots els mètodes mencionats estan explicats detalladament al document de “State of the art”) |
| O3.3 | (Comparteix metodologia amb els objectius O3.1, O3.2 i O3.3.) | Ambdós treballs comparteixen la mateixa arquitectura la qual es flexible i adaptable a cada cas. On difereixen els dos treballs es alhora de fer la inferència i l’entrenament on TorchMD fa us de les eines disponibles al framework de PyTorch lightning[6].  (Entro en mes detall sobre l’estructura en l’informe de el “State of the art”) |
| O3.4 |  |  |

# Bibliografia:

[1] - K. T. Schütt, P. Kessel, M. Gastegger, K. A. Nicoli, A. Tkatchenko, and K.-R. Müller. **SchNetPack:** **A Deep Learning Toolbox For Atomistic Systems**. *Journal of chemical theory and computation*, 2019, 15, 448-455.

[2] - Stefan Doerr, Maciej Majewski, AdriàPérez, Andreas Krämer, Cecilia Clementi, Frank Noe, Toni Giorgino, and Gianni De Fabritiis. **TorchMD: A Deep Learning Framework for Molecular Simulations**. *Journal of chemical theory and computation*, 2021, 17, 2355−2363.

[3] - MD17 (Molecular Dynamics 17): <https://paperswithcode.com/dataset/md17> (accessed 5/3/2023).

[4] - Molecular Property Prediction on QM9: https://paperswithcode.com/sota/molecular-property-prediction-on-qm9 (accessed 05/3/2023).

[5] - Takeru Miyagawa, Kazuki Mori, Nobuhiko Kato , Akio Yonezu. **Development of neural network potential for MD simulation and its application to TiN.** *Computational Material Sciencie*, 15 April 2022, 111303.

[6] - Falcon, W. PyTorch Lightning. 2019, GitHub. https://github. com/PyTorchLightning/pytorch-lightning (accessed 24/3/2023).