# Informe Progrés 1

# INTRODUCCIÓ:

En aquest segon informe de progrés, es detalla l'evolució del projecte en qüestió, el qual ha experimentat canvis imprevistos a causa de la situació documentada anteriorment sobre la publicació de SchNetPackV2. Aquests imprevistos han obligat a adoptar una nova direcció en el projecte, amb l'establiment de nous objectius. Malgrat aquests canvis, s'ha mantingut la mateixa metodologia descrita en l'informe inicial, amb adaptacions realitzades a la fase 4, i la decisió de descartar la fase 5, que inicialment es considerava opcional.

# Planificació V2:

La nova planificació de la fase 4 del projecte consisteix en l'optimització dels models proporcionats per la toolbox SchNetPackv2 sobre la base de dades QM9, QM9 és una base de dades química que s'ha convertit en un referent en el camp de la Dinàmica Molecular (DM) i l'aprenentatge automàtic aplicat a la DM. Prové de l'estudi teòric i computacional de molècules orgàniques de baixa massa, i conté informació detallada sobre diverses propietats químiques clau.

En la primera fase, ens centrarem en l'ajust dels hiperparàmetres estrictament computacionals de la fase de predicció dels models. Aquests hiperparàmetres, com la taxa d'aprenentatge (learning rate), el nombre d'èpoques d'entrenament (epochs) i la mida del lot (batch size), tenen un impacte directe en el procés d'entrenament i afecten el rendiment del model. Mitjançant la cerca i l'optimització d'aquests atributs explícitament computacionals, buscarem aconseguir el millor rendiment possible dels models.

En la segona fase, canviarem el focus de l'estudi als paràmetres interns de SchNetPack, com la llista de veïns neighbor list i els paràmetres dels models de representació entre d’altres.

Per dur a terme aquestes fases d'optimització, s’utilitza la plataforma Wandb, que proporciona eines eficaces per gestionar i monitorar els experiments d'aprenentatge automàtic. Amb Wandb, podrem visualitzar els resultats, comparar diferents experiments, fer un seguiment de mètriques clau i emmagatzemar models i resultats per a un accés posterior. Això ens permetrà realitzar proves iteratives i ajustar els hiperparàmetres i paràmetres interns dels models SchNetPackv2 amb l'objectiu d'aconseguir el millor rendiment possible.

# 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 |

# Conclusions:

# Observacions:

# 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).

[7] - Kristof T. Schütt, Stefaan S. P. Hessmann, Niklas W. A. Gebauer, Jonas Lederer, Michael Gastegger**; SchNetPack 2.0: A neural network toolbox for atomistic machine learning.** *J. Chem. Phys.* 14 April 2023; 158 (14): 144801