* **Informe inicial**. L'objectiu principal de l'informe és el de consignar una **proposta detallada del TFG**, en què es proposen els **objectius a assolir** i la **metodologia a utilitzar** per assolir els fins proposats. Així mateix, s'han de **planificar detalladament** els diferents passos a seguir en el desenvolupament del mateix,  tant pel que fa a tasques a realitzar com de forma temporal. Aquesta proposta requereix, per tant, d'una reflexió prèvia per part de l'estudiant, que haurà de **consultar les fonts d'informació pertinents**, de manera que li sigui possible justificar les seves eleccions i programa de treball. Haurà d’incloure, **com a mínim**:
* Informació preliminar sobre la qüestió a tractar o el problema a resoldre, especificant i comentant les fonts d'informació utilitzades.
* Una proposta de l'objectiu del TFG i/o de fins on es vol arribar en el desenvolupament de la qüestió o problema proposat.
* Explicació general de la metodologia que es seguirà per aconseguir els objectius proposats.
* Identificació dels passos a seguir per al desenvolupament del projecte proposat, establint una planificació de treball per dur-lo a terme.
* Bibliografia de referència consultada i fonts complementàries.

**SUMARI DE L’INFORME INICIAL**

1. **INFORMACIO PRELIMINAR / ANTECEDENTS**

La simulació computacional del comportament de molècules a partir de la solució numèrica de les lleis físiques que les governen és possible, però és un procés lent i ineficient per la gran complexitat de les equacions. Les xarxes neuronals (a partir d'ara NN) són conegudes i sovint aplicades en aquests casos per la seva gran capacitat d’accelerar els processos.

El projecte proposa fer la revisió dels treballs publicats en camps similars i fer-ne una adaptació/millora de les metodologies aplicades en aquests per poder-les aplicar en al camp de la simulació de les interaccions moleculars (a partir d’ara MD).

Treballs revisats:

* + 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. [Link](https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.8b00908)
  + 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. [Link](https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.0c01343)
  + 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. [Link](https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0927025622000970)

1. **OBJECTIU DEL TFG**

Definir, entrenar i validar una arquitectura de NN capaç de dur a terme simulacions de MD entre molècules senzilles.

1. **METODOLOGIA**

Separaré el projecte en etapes per tal de poder estructurar millor el procés i la carga de treball.

* + **Etapa 1 (Investigació preliminar):** primer de tot haurem de determinar quin/s dels treballs utilitzaren com a punt de partida, partim de 3 treballs que he escollit donat a la proximitat a l’idea inicial que tenia per el TFG.
  + **Etapa 2 (Estudi profund**): una vegada escollida el treball, fer una lectura i anàlisis mes profund i una prova del codi per tal de entendre el funcionament d’aquest i realitzar un informe per extreure els punts principals.
  + **Etapa 3 (Millores/canvis):** a partir de l’informe realitzat,

1. **PLANIFICACIO**