

MACE-MP-0 re-parametrizzato per i polimorfi del ghiaccio (funzionale DFT revPBE-D3)

TRAINING

Training set:

- 9 geometrie per ciascun polimorfo in DMC-ICE13 ottenute da dinamica molecolare NPT a pressione 1 bar e temperatura 100 K (dinamica molecolare eseguita con MACE-MP-0);
- 9 geometrie per 6 fasi gassose (singola molecola d'acqua, dimero, trimero, tetramero, pentamero, esamero) ottenute da dinamica molecolare NVT con volume cubico di lato ~ 20 Å e temperatura 100 K (dinamica molecolare eseguita con MACE-MP-0).

Re-allenamento di MACE-MP-0:

- 80% del training set usato per la fase di training, 20% usato come test set;
- 2000 iterazioni di ottimizzazione della loss function.

Riassunto degli errori di training:

set	RMSE energia (meV/atomo)	RMSE forze (meV/Å)	RMSE stress (meV/Å ³)
training	0.4	5.5	0.4
test	0.6	13.7	0.5

PERFORMANCE

Performance del modello per le energie di legame in fase gassosa:

- Energia di legame di dimero, trimero, tetramero, pentamero, esamero riprodotte con errore minore di 0.1 kJ/mol.

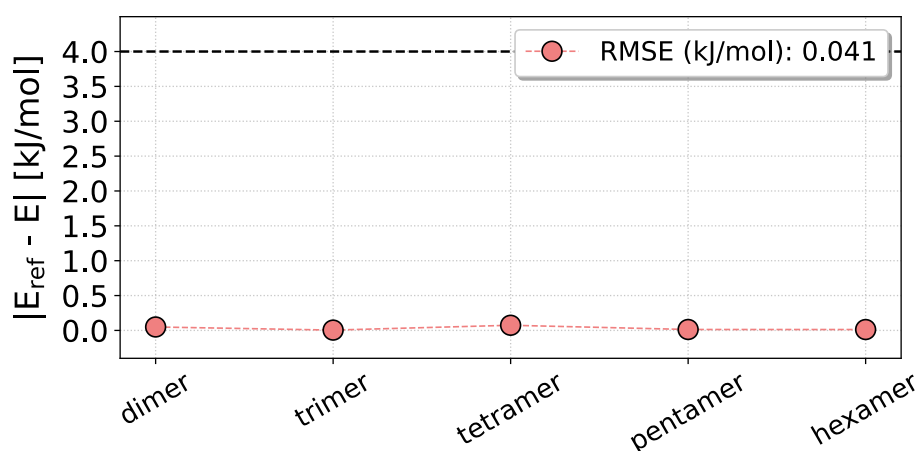


Figure 1 Performance del nuovo modello sull'energia di legame di cluster d'acqua in fase gassosa. La figura mostra la differenza tra l'energia di legame del metodo di riferimento (revPBE-D3) e l'energia di legame con il nuovo modello. Lo scarto quadratico medio (RMSE) è 0.04 kJ/mol

Performance del modello per le energie di reticolo dei polimorfi in DMC-ICE13:

- Energia di reticolo ottenuta con errore minore di 0.5 kJ/mol.

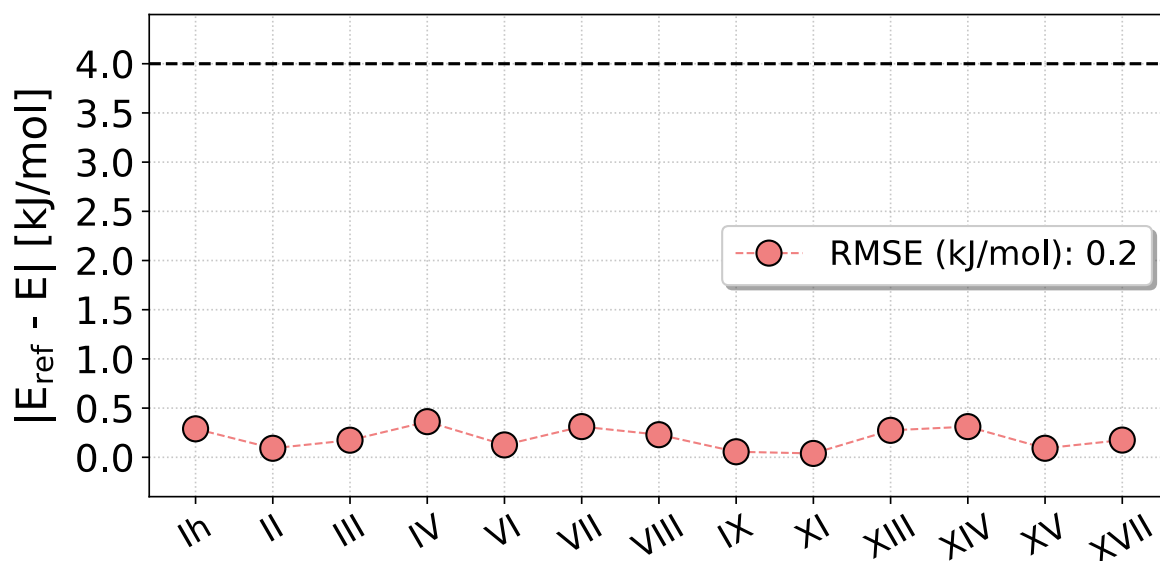


Figure 2 Performance del nuovo modello sull'energia di reticolo dei polimorfi in DMC-ICE13. La figura mostra la differenza tra l'energia di legame calcolata con il metodo di riferimento (revPBE-D3) e con il nuovo modello. Lo scarto quadratico medio (RMSE) è 0.2 kJ/mol.

Performance del modello per l'equazione di stato dei polimorfi in DMC-ICE13:

- Volumi di equilibrio ottenuti con errore < 3 %

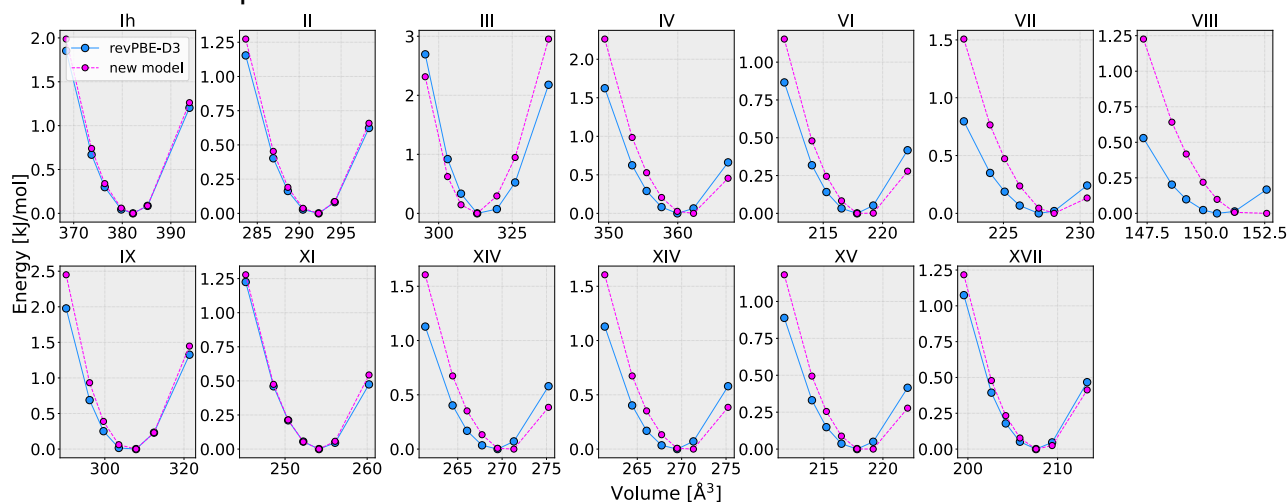


Figure 3 Performance del modello per l'equazione di stato dei polimorfi in DMC-ICE13. La figura mostra l'energia del solido in funzione del volume con il metodo di riferimento revPBE-D3 (blue) e il nuovo modello (magenta). I volumi di equilibrio (calcolati fittando con l'equazione di Birch-Murnaghan) sono riprodotti con errore < 3 %.