

# 球填充的结构识别

## Sphere Packing Structure Identification

### 深度学习技术与应用大作业（自选）

王宇涛

北京大学

2020 年 6 月 10 日

# 目录

课题背景

问题阐述

模型训练

结果讨论

## 填充问题

大自然中存在着大量颗粒以及它们集合在一起形成的系统，这种  $d$  维欧几里得空间内不重叠实体的集合定义为填充（Packing），填充率或填充密度（Packing density）即是实体总体积与整个填充空间体积的比值。

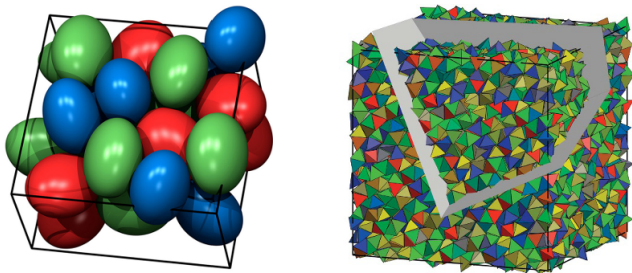


图 1: 椭球和正四面体的填充 [1, 2]

# 结构识别

识别填充结构的指标有很多，如径向分布函数 (RDF)、键方向序参数 (BOO)、键方向序图 (BOOD)、共同邻域分析法 (CNA) 等等。

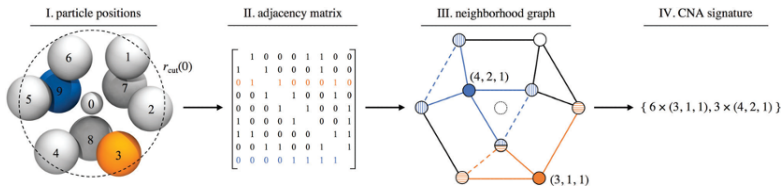


图 2: CNA 的计算方法 [3]

# 机器学习在结构识别中的应用

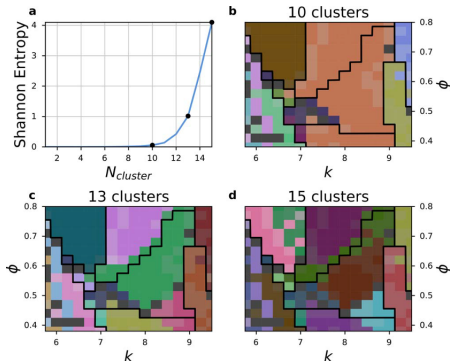


图 3: 混合高斯聚类 [4]

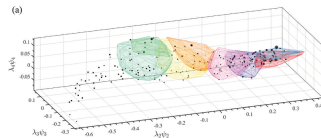


图 4: 流形学习降维图 [3]

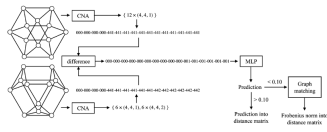


图 5: 多层感知器预测模型 [3]

# 球填充的结构识别

本文的目的是使用深度学习对填充结构进行分类，首先以球填充为例，以期扩展到椭球和正四面体等非球体。

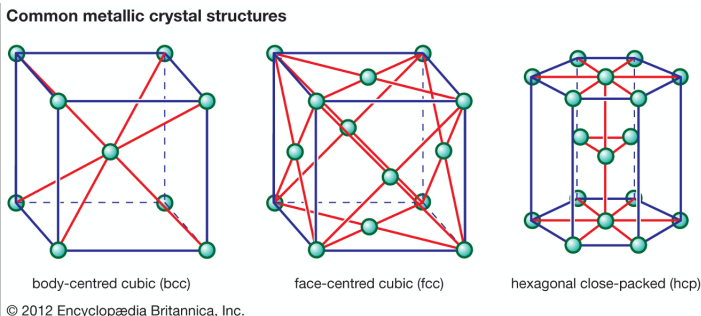


图 6: 球的常见填充结构

# 原始数据准备

原始数据来源于师兄提供的 10 组球填充数据，每组球填充由 Monte Carlo 生成，1 组填充数据即 1 个周期边界的晶胞，每个晶胞包含 1728 个颗粒。

1728		
21.7694882452975		
19.3346218657162	8.07927659951736	0.83360204941917
18.9700689730794	15.1645937710883	1.64121439921973
15.7441781583965	4.75271781013523	3.43940869020741
18.0215166021346	7.800905831642	18.421573366732

图 7: 数据示例

第一行为颗粒数目；第二行为周期边界长度；第三行及以后为每个颗粒的三维坐标。

## 数据标注

本文使用有监督的学习方法，因此需要对原始数据进行标注。使用 OVITO 中的 CNA 结构识别方法，可以将每个颗粒分类为 Other(0)，FCC(1)、HCP(2)、BCC(3)、ICO(4)。

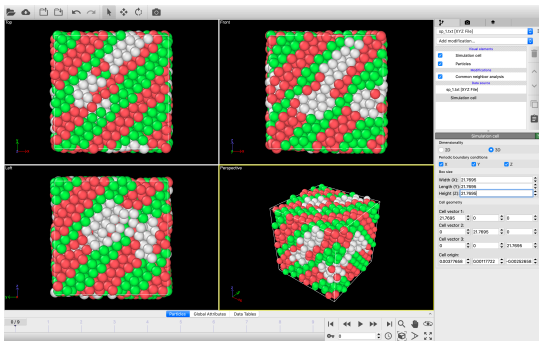


图 8: OVITO



# 数据预处理

## 邻域颗粒采样

一个颗粒的结构与其周围颗粒相关，因此需要将邻域内的颗粒进行采样，以此作为中心颗粒的结构表示。本文取邻域半径为 2.5，最大邻域颗粒数为 12，因此每个颗粒的结构可表示为  $12 \times 3$  的坐标矩阵，这种表示方法称为点云（Point Cloud）。

## 样本扩充

样本总量为 17280，用于训练远远不够，考虑到结构的旋转不变形，因此将原有数据集通过随机旋转进行扩充。最终的数据集大小为 90000，有着三类结构，每一类结构有着 30000 个样本，由此构成了一个三分类问题。

## 网络结构

参照 PointNet[5], 取出其局部结构, 并减少隐藏层节点数, 构造一个简单的类 PointNet 网络。

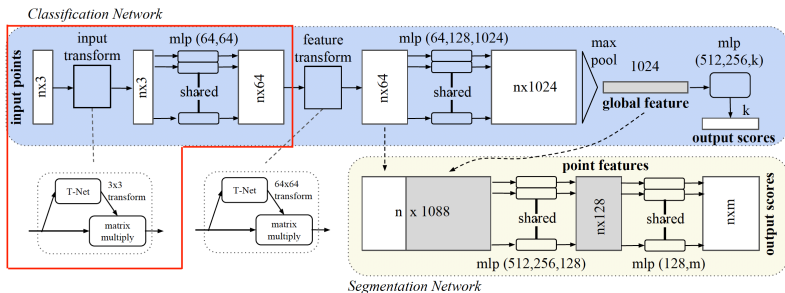


图 9: PointNet 结构

# 超参数

## 主干网络

输入形状为  $(12,3)$ ，首先与变换网络相乘，得到的形状不变；第一层卷积核形状为  $(1,3)$ ，输出通道数为 16；第二、第三层卷积核形状为  $(1,1)$ ，输出通道数分别为 32 和 64；后接大小为  $(12,1)$  的最大池化层；然后再接节点数分别为 32、16 的全连接层；最后接节点数为 3 的全连接层，输出分类。

## 变换网络

变换网络与主干网络相似，除了最后一层节点数改为 9，然后转换为  $(3,3)$  的矩阵，该矩阵应约束为正交矩阵，表现为对原有点云的旋转变换。

# 损失函数与训练方式

## 损失函数

1. 第一部分为分类交叉熵损失，权重为 1；
2. 第二部分损失是将变换网络输出约束为正交矩阵，权重为 0.05。

$$L_{reg} = \|I - AA^T\|_F^2$$

## 训练方式

训练方式为 Adam，学习率为 0.001，训练 100 轮。

## 训练曲线

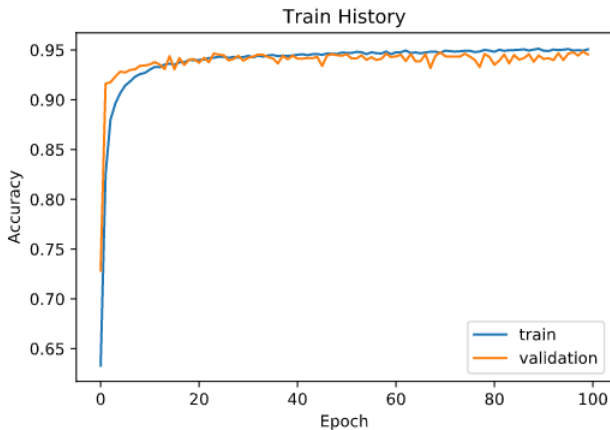


图 10: 训练曲线

# 模型测试

## 测试数据

测试数据来源于师兄提供的另外 10 组球填充数据，每组球填充由 Monte Carlo 生成，1 组填充数据即 1 个周期边界的晶胞，每个晶胞包含 4000 个颗粒。

与训练集不同的是，测试集均为 RCP 结构，即没有 FCC 与 HCP 结构的颗粒，因此标签均为 0。

## 准确率

选取其中一个晶胞进行测试，准确率为 96.975%。

# 结论

## 结果讨论

- ▶ 通过深度学习，直接从颗粒坐标入手，便可以获得其结构特征，而无需像 CNA 方法需要计算三个参数；
- ▶ 但是该方法仍需要提前采样邻域颗粒，邻域半径的设定需要先验知识。

## 下一步工作

- ▶ 参考 [6]，使用改进后的 PointNet++ 自动采样邻域信息，减少对先验知识的依赖；
- ▶ 参考 [7]，基于 PointNet 构造自编码器进行无监督学习，争取在没有标签数据的情况下自动对结构进行聚类；
- ▶ 颗粒形状从球扩展到椭球和正四面体。

## 参考文献 1

- [1] Jin, W., et al., Dense crystalline packings of ellipsoids. *Phys Rev E*, 2017. 95(3-1): p. 033003.
- [2] Haji-Akbari, A., et al., Disordered, quasicrystalline and crystalline phases of densely packed tetrahedra. *Nature*, 2009. 462(7274): p. 773-7.
- [3] Reinhart, W.F., et al., Machine learning for autonomous crystal structure identification. *Soft Matter*, 2017. 13(27): p. 4733-4745.
- [4] Spellings, M. and S.C. Glotzer, Machine learning for crystal identification and discovery. *Aiche Journal*, 2018. 64(6): p. 2198-2206.



## 参考文献 II

- [5] Qi, C.R., et al. Pointnet: Deep learning on point sets for 3d classification and segmentation. in Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2017.
- [6] Qi, C.R., et al. Pointnet++: Deep hierarchical feature learning on point sets in a metric space. in Advances in neural information processing systems. 2017.
- [7] Achlioptas, P., et al., Learning representations and generative models for 3d point clouds. arXiv preprint arXiv:1707.02392, 2017.