

Simulações Dinâmicas de Nanomateriais usando Potenciais Atomísticos obtidos por Inteligência Artificial

Modalidade: Iniciação Científica

Pesquisador Responsável: Dr. Gabriel Ravanhani Schleder

Unidade do CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano)

1. Introdução e estado da arte

Nanomateriais são amplamente estudados por causa de suas propriedades físicas e químicas distintas em comparação com seus equivalentes em macroescala. A simulação computacional é uma ferramenta essencial para estudar essas propriedades em escala atômica. Uma abordagem comum é usar potenciais interatômicos para descrever as interações entre átomos em um material. No entanto, a criação de potenciais interatômicos precisos é um desafio, pois exige uma quantidade significativa de dados simulação e até experimentais.

Neste projeto, propomos utilizar redes neurais de grafos equivariantes E(3) para desenvolver potenciais interatômicos precisos para a simulação de clusters de ZrO_2 e $MoSe_2$ 2D. Essa abordagem apresenta várias vantagens, incluindo alta eficiência de dados e precisão.

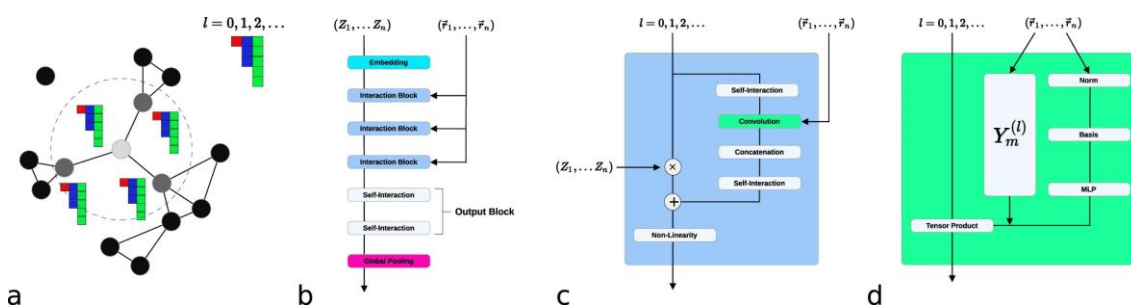


Figura 1: **a)** Um conjunto de átomos é interpretado como um grafo atômico com vizinhanças locais, **b)** números atômicos são embutidos em características $l=0$, refinadas por uma série de blocos de interação, criando features escalares e tensores de ordem superior. Um bloco de saída gera energias atômicas, que são agrupadas para fornecer a energia total. **c)** O bloco de interação, contendo a convolução. **d)** A convolução combina o produto da função radial $R(r)$ e a projeção harmônica esférica do vetor unitário r_{ij} com features dos vizinhos por meio de um produto tensorial. Reproduzido de [1].

O conceito de equivariância surge naturalmente no aprendizado de máquina de sistemas atomísticos: propriedades físicas têm transformações bem definidas sob translação, reflexão e rotação de um conjunto de átomos. As redes neurais equivariantes são capazes de representar de forma mais geral propriedades e operações de tensores de sistemas físicos (por exemplo, adição de vetores, produtos escalar e vetorial). As redes neurais equivariantes garantem a

preservação das propriedades de transformação conhecidas dos sistemas físicos sob uma mudança de coordenadas porque são explicitamente construídas a partir de operações equivariantes [4].

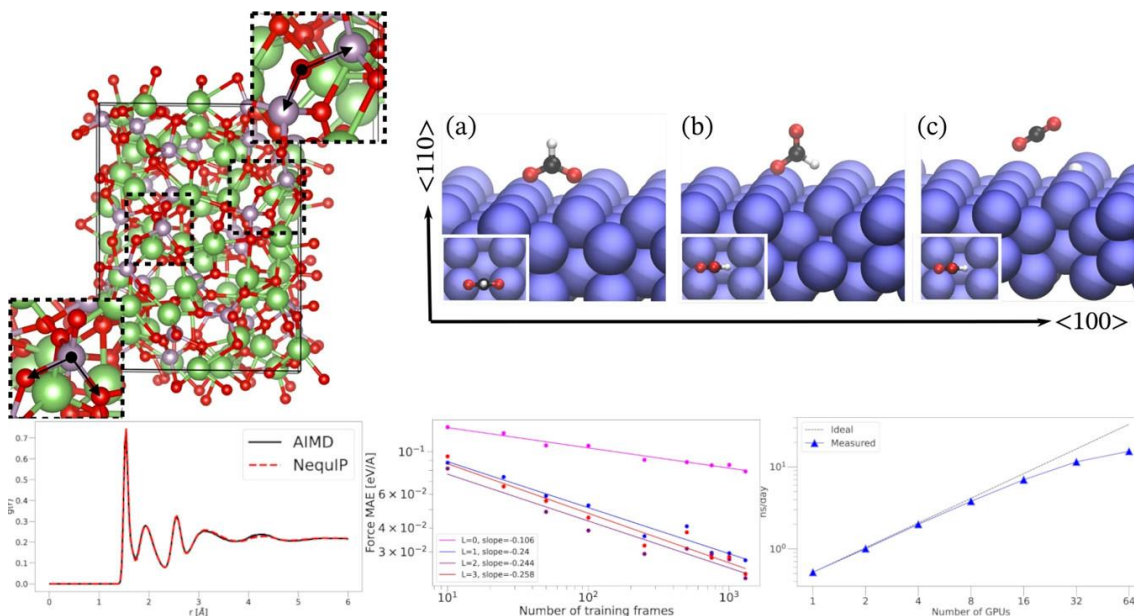


Figura 2: Benchmarks em sistemas multi-elementos. (Cima esquerda) Vidro amorfo congelado de $\text{Li}_4\text{P}_2\text{O}_7$. (Cima direita) Reação de HCOO em superfície de Cu . (Baixo esquerda) A função de distribuição de pares $g(r)$ comparando o potencial ML com a dinâmica ab initio. (Baixo meio) Curva de treinamento mostrando o erro nas forças do potencial em função do número de frames de treinamento. (Baixo direita) Eficiência das simulações com o potencial, escalando com o número de GPUs. Reproduzido de [1, 2].

2. Objetivos

Este projeto objetiva o desenvolvimento e uso de potenciais interatômicos E(3)-Equivariantes [1] obtidos por meio de redes neurais *message-passing*, um tipo de rede neural de grafos (GNN), para a simulação de propriedades estruturais de nanomateriais. Essa metodologia foi recentemente proposta e já demonstrou ser o método mais eficiente em termos de treinamento e tempo de execução, e hoje é o estado da arte na área, tanto para simulações moleculares como de sólidos. Recentemente em [2] demonstraram uma simulação escalável de 100 milhões de átomos.

Portanto, aqui propõe-se seu uso para a simulação de propriedades estruturais dinâmicas de nanomateriais. Em específico, para a simulação de experimentos realizados no Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano), como por exemplo os processos de ruptura de nanoflakes de materiais 2D e nanoclusters de óxidos, processos estes que são visualizados por microscopia de alta resolução (HRTEM) *in situ* [3].

O projeto tem como resultados esperados tanto desenvolvimento e validação metodológica, como resultados aplicados dos sistemas físicos mencionados.

Planeja-se desenvolver potenciais interatômicos precisos para clusters de ZrO_2 e $MoSe_2$ 2D usando redes neurais de grafos equivariantes E(3). Isso permitirá prever com precisão várias propriedades estruturais e dinâmicas desses materiais, incluindo estabilidade e propriedades mecânicas. Além disso, compararemos os resultados obtidos para destacar as vantagens do método proposto.

3. Metodologia

Como metodologia para desenvolver o potencial interatômico E(3)-equivariante GNN, coletaremos dados de simulação por meio de simulações da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e experimentais de clusters de ZrO_2 e $MoSe_2$ 2D, que serão executadas em nosso cluster de computação de alto desempenho (HPC) do LNNano. Em seguida, treinaremos o modelo E(3)-equivariante GNN usando esses dados com o uso do software *NequIP*, em linguagem de programação *python*, para então prever com precisão as interações interatômicas. Em seguida, usaremos o potencial interatômico desenvolvido para simular as propriedades estruturais dos materiais por meio de simulações de dinâmica molecular (MD), utilizando o software LAMMPS.

Referências Bibliográficas

1. S. Batzner, A. Musaelian, L. Sun, M. Geiger, J. P. Mailoa, M. Kornbluth, N. Molinari, T. E. Smidt, and B. Kozinsky, E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials, [Nature Communications 13, 2453 \(2022\)](#).
2. A. Musaelian, S. Batzner, A. Johansson, L. Sun, C. J. Owen, M. Kornbluth, and B. Kozinsky, Learning local equivariant representations for large-scale atomistic dynamics, [Nature Communications 14, 579 \(2023\)](#).
3. B. Focassio, T. E. R. Fiuza, J. Bettini, G. R. Schleder, M. H. M. Rodrigues, J. B. Souza Junior, E. R. Leite, A. Fazzio, and R. B. Capaz, Stability and rupture of an ultrathin ionic wire, [Phys. Rev. Lett. 129, 046101 \(2022\)](#).
4. K. Atz, F. Grisoni, and G. Schneider, Geometric deep learning on molecular representations, [Nature Machine Intelligence 3, 1023 \(2021\)](#).