

Inteligência Artificial aplicada à Simulações Dinâmicas de Nanomateriais

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.

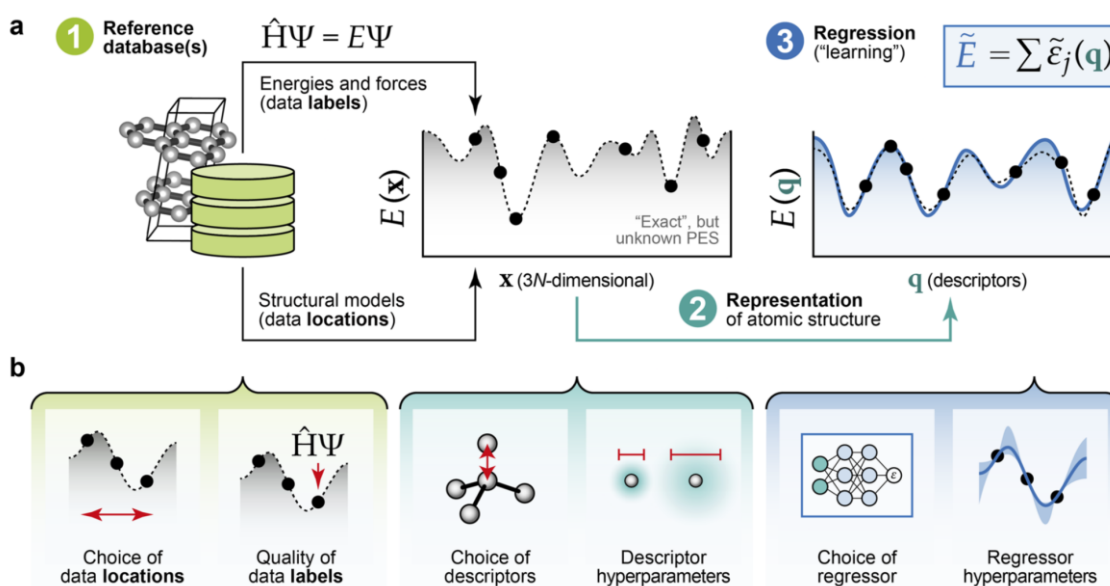


Figura 1: Potenciais interatômicos de aprendizado de máquina (MLIPs). **(a)** Visão geral da metodologia, com os três principais "ingredientes" destacados: o banco de dados (1) contém modelos estruturais representativos que são rotulados com energias e forças reais [normalmente obtidas usando a teoria do funcional de densidade (DFT)]; a representação (2) codifica o ambiente atômico, expresso pelo vetor geral \mathbf{q} ; a tarefa de regressão cria o modelo, \tilde{E} , e nos modelos potenciais de ML atuais, é comum prever a energia total como uma soma das energias locais aprendidas pela máquina, $\tilde{\epsilon}$. **(b)** Critérios e escolhas que afetam a qualidade de um potencial de ML, indicados por esquemas. A codificação por cores corresponde ao painel (a) e indica os efeitos das bases de dados de referência em verde, das representações (descritores) em turquesa e da estrutura de regressão em azul. Reproduzido de [2].

Os potenciais interatômicos de aprendizado de máquina (MLIPs) são uma das principais técnicas na caixa de ferramentas da ciência dos materiais, capazes de unir a precisão de métodos quânticos com a eficiência computacional dos campos de força clássicos. Isso permite simulações que vão desde átomos, moléculas e biosistemas até materiais sólidos, superfícies, nanomateriais e suas interfaces e interações complexas. Uma classe recente de MLIPs avançados, que usam representações equivariantes e redes neurais de grafos profundos, é conhecida como "modelos universais". Estes modelos são propostos como modelos fundamentais adequados para qualquer sistema, cobrindo a maioria dos elementos da tabela periódica. Os atuais MLIPs universais (UIPs) foram treinados com o maior conjunto de dados consistente disponível atualmente. No entanto, estes são compostos principalmente por cálculos DFT de materiais sólidos.

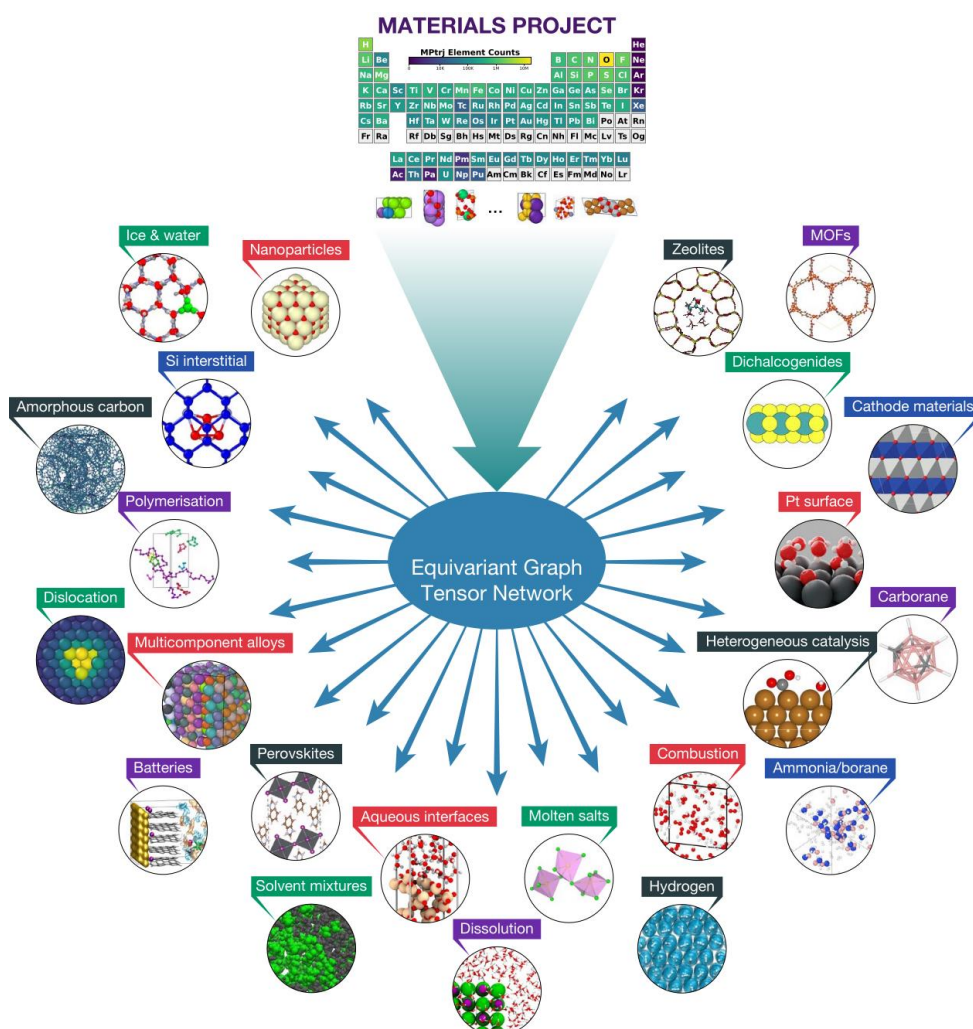


Figura 2: Potenciais interatômicos de aprendizado de máquina universais (UIPs) são propostos como modelos fundamentais, podendo ser aplicados em simulações de sistemas dos mais diversos. Reproduzido de [3].

2. Objetivos

Neste projeto, avaliaremos a universalidade de todos os UIPs disponíveis abertamente, nomeadamente MACE, CHGNet e M3GNet, em tarefas de generalização: cálculo de energias superficiais e de nanopartículas. Avaliaremos se os UIPs são um ponto de partida eficiente para o ajuste fino de modelos especializados, visando aumentar a cobertura do espaço de materiais em direção a conjuntos de dados de treinamento universais para MLIPs. Feito isso, aplicaremos os potenciais para simulações de dinâmica molecular em sistemas de interesse do LNNano, tal como 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* [5]. O projeto tem como resultados esperados tanto desenvolvimento e validação metodológica, como resultados aplicados dos sistemas físicos mencionados.

3. Metodologia

Como metodologia para validar e desenvolver os potenciais interatômico equivariantes 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 os modelos usando os dados com o uso de bibliotecas 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. Bruno Focassio, Luis Paulo Mezzina Freitas, Gabriel R. Schleder. Performance Assessment of Universal Machine Learning Interatomic Potentials: Challenges and Directions for Materials' Surfaces. [arXiv:2403.04217 \(2024\)](https://arxiv.org/abs/2403.04217).
2. Joe D. Morrow, John L. A. Gardner, Volker L. Deringer. How to validate machine-learned interatomic potentials. [J. Chem. Phys. 158, 121501 \(2023\)](https://doi.org/10.1063/5.0139611); doi: 10.1063/5.0139611
3. Ilyes Batatia et al. A foundation model for atomistic materials chemistry. [arXiv:2401.00096 \(2024\)](https://arxiv.org/abs/2401.00096).
4. 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 \(2023\)](https://doi.org/10.1038/s41467-023-44579-4).
5. 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 \(2022\)](https://doi.org/10.1063/1.5046101).