

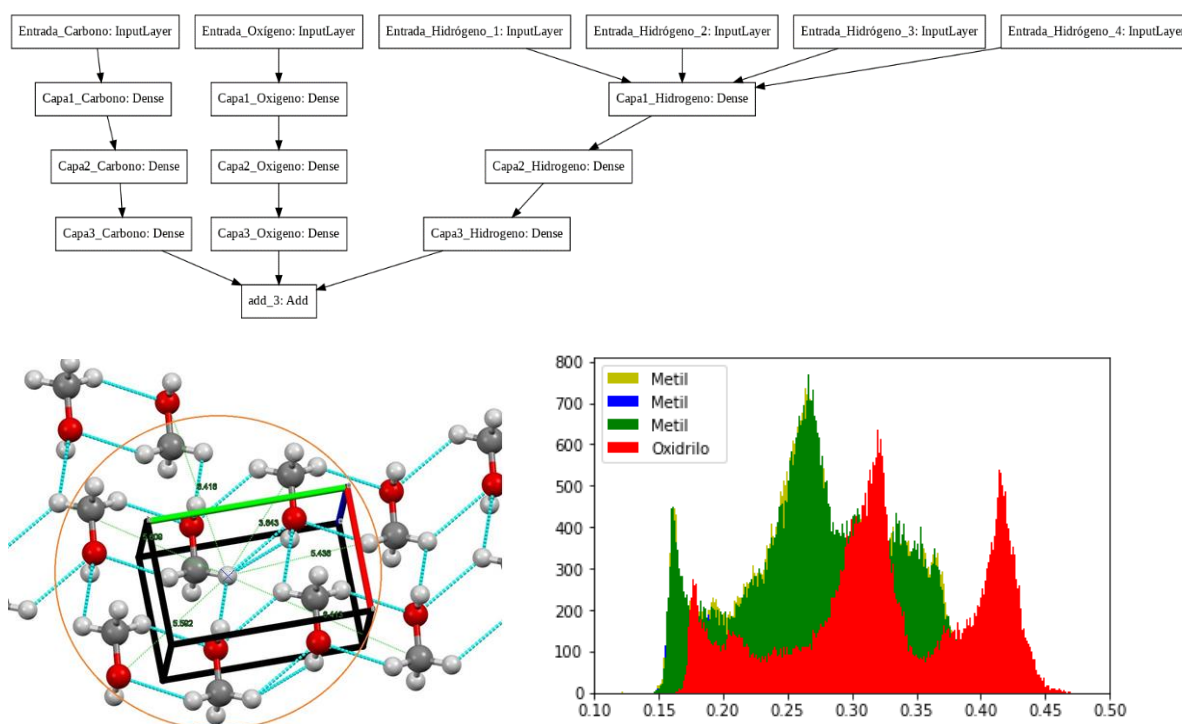
PREDICCIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS USANDO REDES NEURONALES

Dirección: Dr. Gabriel I. Pagola (gpagola@df.uba.ar)

Grupo de trabajo: Dr. Gabriel I. Pagola, Dra Marta B. Ferraro y Dr. Pablo E. Gaztañaga

Introducción:

Desde hace dos décadas, nuestro grupo trabaja en la predicción de estructuras de cristales moleculares usando un código propio basado en algoritmos genéticos, Modified Genetic Algorithms for Crystals (MGAC). En la versión actual del código (en desarrollo [1]), las optimizaciones locales de las estructuras se realizan a nivel Density Functional Theory (DFT) empleando el código Quantum Espresso (QE). [2] Dado que estos cálculos insumen mucho tiempo de cómputo, en los últimos dos años, hemos estado diseñando e implementando redes neuronales para obtener los valores de energía del sistema, [3] en forma similar a la previamente reportada por Behler y Parrinello, donde la energía del sistema se obtiene como la suma de las energías de cada uno de los átomos que lo componen. [4] Estas redes se han desarrollado utilizando el paquete Tensor Flow. [5] Las redes realizan un aprendizaje supervisado siendo alimentadas en la entrada con los descriptores de la estructura y minimizando el error cuadrático medio entre la energía predicha y la obtenida en cálculos de Quantum Espresso. La selección del conjunto de parámetros de entrada de la red neuronal (descriptores) que permitan representar lo mejor posible a la estructura cristalina resulta ser una cuestión crucial. Dichos descriptores deben ser invariantes desde el punto de vista traslacional y rotacional y no depender de la elección (relativamente arbitraria) de la celda unidad empleada y además deben permitir describir cristales de cualquier grupo cristalográfico, que contengan, por ejemplo, distintos números de moléculas en la celda unidad, distintas operaciones de simetría, etc. Por último, los descriptores deben ser lo suficientemente versátiles para poder representar unívocamente a cada cristal. En nuestro caso, hemos comenzado con descriptores sugeridos en la literatura. [6]



Propuesta de trabajo:

Empleando como sistema molecular de trabajo un sistema orgánico de tamaño medio a pequeño que contenga C, O, H, se propone:

- Probar con distintos conjuntos de parámetros en los descriptores que representan la estructura cristalina.
- Testear distintas arquitecturas de redes neuronales.
- Obtener la hipersuperficie de energía en función de los descriptores que representan al cristal molecular y obtener sus mínimos con un nivel de precisión comparable con el propio QE.

Factibilidad:

En cuanto a los recursos computacionales: contamos con un cluster propio de 18 máquinas, y con acceso los clusters CECAR y DIRAC de esta facultad. Además, el grupo tiene acceso, vía la colaboración establecida desde hace unas dos décadas entre la Prof. Ferraro y el Prof. Facelli, a todos los clusters del Center for High Performance Computing (CHPC: www.chpc.utah.edu).

[1] Tesis doctoral de la Lic. Kristal Varela , Dirección: G.I. Pagola, en desarrollo.

[2] www.quantum-espresso.org

[3] Trabajo postdoctoral del Dr. Pablo Gaztañaga, Dirección: M.B. Ferraro, co-dirección: G.I. Pagola, en desarrollo.

[4] Behler, M. Parrinello, Phys. Rev. Lett., 98.146401 (2007)

[5] www.tensorflow.org

[6] P. Geiger, C. Dellago, J. Chem. Phys. 139 (2013), 164105; J. S. Smith, O. Isayev, A. E. Roitberg, Chem. Sci., 8 (2017), p.p 3192-3203