

УДК 519.6

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СВЕРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ЗАДАЧАХ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ МЕТОДА КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Жариков Дмитрий Николаевич¹, Завьялов Дмитрий Викторович², Сивашова Екатерина Сергеевна³

¹Аспирант;

Волгоградский государственный технический университет;
Россия, 400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28;
e-mail: dimitrol@mail.ru.

²Заведующий кафедрой физики;

Волгоградский государственный технический университет;
Россия, 400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28;
e-mail: sinegordon@gmail.com.

³Аспирант;

Волгоградский государственный технический университет;
Россия, 400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28;
e-mail: laei@mail.ru.

В работе рассмотрен подход к восстановлению сил межатомного взаимодействия с помощью конволюционной нейронной сети в модельной системе двумерного газа точечных бесструктурных частиц. Представлены предварительные результаты обучения сети.

Ключевые слова: нейронная сеть, молекулярная динамика, межатомный потенциал.

Для цитирования:

Жариков Д. Н., Завьялов Д. В., Сивашова Е. С. Использование сверточных нейронных сетей в задачах восстановления потенциала межатомного взаимодействия для метода классической молекулярной динамики // Системный анализ в науке и образовании: сетевое научное издание. 2022. № 2. С. 28–32. URL : <http://sanse.ru/download/470>.

USE OF CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORKS IN PROBLEMS OF RECOVERY OF THE INTERATOMIC INTERACTION POTENTIAL FOR THE CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Zharikov Dmitry N.¹, Zavyalov Dmitry V.², Sivashova Ekaterina S.³

¹PhD student;

Volgograd State Technical University;
28 Lenina Av., Volgograd, 400005, Russia;
e-mail: dmitrol76@mail.ru.

²Head of physics department;

Volgograd State Technical University;
28 Lenina Av., Volgograd, 400005, Russia;
e-mail: sinegordon@gmail.com.

¹Выпуск подготовлен в рамках реализации гранта на разработку программ бакалавриата и программ магистратуры по профилю «Искусственный интеллект», а также на повышение квалификации педагогических работников образовательных организаций высшего образования в сфере искусственного интеллекта (конкурс 2021-ИИ-01 от 10.06.2021)

³PhD student;

Volgograd State Technical University;
28 Lenina Av., Volgograd, 400005, Russia;
e-mail: laei@mail.ru.

The paper considers an approach to restoring the forces of interatomic interaction using a convolutional neural network in a model system of a two-dimensional gas of pointless structureless particles. The preliminary results of network training are presented.

Keywords: Neural Network, Molecular dynamics, Interatomic potential.

For citation:

Zharikov D. N., Zavyalov D. V., Sivashova E. S. Use of convolutional neural networks in problems of recovery of the interatomic interaction potential for the classical molecular dynamics method. System Analysis in Science and Education, 2022;(2):28–32(In Russ). Available from: <http://sanse.ru/download/470>.

Введение

Метод классической молекулярной динамики является одним из самых популярных методов современной вычислительной физики [ссылки]. Идея метода заключается в том, чтобы описать временную эволюцию системы взаимодействующих атомов прямым интегрированием их уравнений движения. При достаточно большом размере модельной системы (обычно порядка десятков-сотен тысяч атомов) ее основные термодинамические характеристики в результате моделирования можно определить с хорошей точностью. Центральным моментом, определяющим точность моделирования, является верный расчет сил взаимодействия атомов в зависимости от их взаимного расположения. Хотя исторически для этого использовались простые аналитические выражения [1-3], в последнее время машинное обучение (ML) межатомных потенциалов [4-8] все чаще используются для параметризации межатомных взаимодействий. Один из самых популярных на данный момент подходов для решения этой задачи – графовые сверточные сети [9-10], что кажется вполне естественным представлением для молекулярных систем, где атомы и связи представлены узлами и ребрами графа. Однако в этом случае дескрипторы атомов становятся довольно сложными сущностями. Для их построения нужно иметь информацию о том, какие атомы связаны с другими. И впоследствии при применении такой сети в моделировании при определении силы, действующей на конкретный атом, кроме координат соседних атомов в определенном радиусе вокруг выделенного, необходимо знать и информацию о связях его с этими соседями, что требует дополнительной памяти для хранения этой информации и времени на ее поиск. Таким образом, по крайней мере для простых систем с немногочисленным количеством связей, актуальной является задача исследования возможности построения сверточной архитектуры, основанной только на информации о координатах и типах соседних атомов для вычисления сил взаимодействия между ними.

1. Модель

Для определения хотя бы принципиальной возможности восстановления сил взаимодействия только по координатам соседей упростим исследуемую модель насколько возможно. Будем рассматривать двумерный газ бесструктурных частиц одного типа, взаимодействующих с помощью какого-то парного потенциала. В принципе для наших целей совершенно неважно какой это будет потенциал – мы выбирали потенциал Леннарда-Джонса и кулоновский потенциал, как наиболее простые модели для систем одинаковых частиц.

В качестве входного дескриптора, определяющего взаимное расположение частиц, принята матрица, строящаяся по следующему правилу – вокруг целевой частицы (той, для которой определяем силу) выбирается квадратная область, которая делится на небольшие квадратные ячейки по n штук вдоль каждой стороны. Искомая матрица представляет собой матрицу размером $n \times n$, в каждой ячейке которой записано целое число – число попавших в соответствующую ячейку частиц. Схематично соответствие показано на рис. 1.

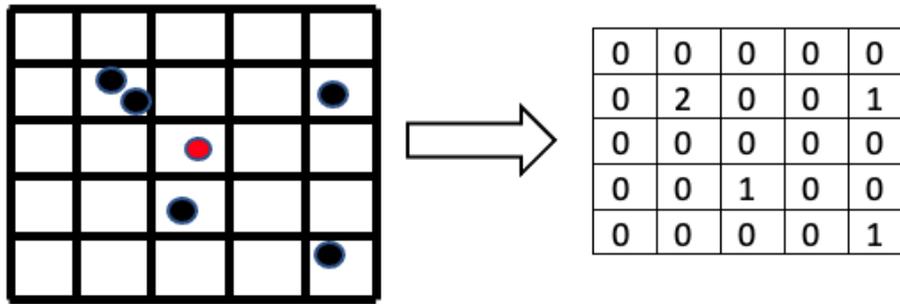


Рис. 1. Построение матрицы-дескриптора целевой частицы (красная частица в центре)

Размер области и ячейки являются настраиваемыми параметрами задачи, зависящими от плотности исходной системы и других физических параметров.

По сути рассматриваемый дескриптор представляет собой картинку в цветовом представлении оттенков серого, где каждая ячейка матрицы – это пиксель изображения. При таком подходе к входным данным разумным кажется использование сверточных сетей с архитектурой типа обычных классификаторов, подобных сети *LeNet* (пример на рис. 2).

	Input	array (size: 1×28×28)
1	ConvolutionLayer	array (size: 20×24×24)
2	Ramp	array (size: 20×24×24)
3	PoolingLayer	array (size: 20×12×12)
4	ConvolutionLayer	array (size: 50×8×8)
5	Ramp	array (size: 50×8×8)
6	PoolingLayer	array (size: 50×4×4)
7	FlattenLayer	vector (size: 800)
8	LinearLayer	vector (size: 500)
9	Ramp	vector (size: 500)
10	LinearLayer	vector (size: 10)
11	SoftmaxLayer	vector (size: 10)
	Output	class

Рис. 2. Архитектура *LeNet*.

Однако перед применением сетей-классификаторов нужно еще договориться каким образом интерпретировать результаты, выдаваемые сетью. Сеть выдает целое число (класс, к которому принадлежит входное изображение), а по смыслу нам нужно вещественное число – сила, действующая на целевую частицу.

Поступаем похожим образом, как при построении матрицы-дескриптора. Так как пространство координат частиц у нас теперь дискретно в силу дискретности входных данных, то возможные значения действующей на целевую частицу силы ограничено сверху значением, которое соответствует взаимодействию частиц в соседних ячейках матрицы-дескриптора. Считаем при этом расстоянием между ячейками расстояние между их центрами. Назовем это значение f_{max} . Разбиваем теперь диапазон $[-f_{max}, f_{max}]$ на необходимое число частей, соответствующих числу выходных классов сети, и будем вещественные значения приводить к номеру класса.

2. Предварительные результаты

В качестве рабочей программной среды для исследования выбран пакет *Wolfram Mathematica* [11], которая начиная с последних версий имеет развитый функционал построения и манипуляций с нейронными сетями различных архитектур. Выбор этой среды, а не *Python* с какими-либо высокоуровневыми библиотеками типа *Keras* (фактически стандартом де-факто сейчас в среде специалистов, занимающихся *ML*) обусловлен значительным опытом использования *Wolfram Language* у исследовательской группы.

Сразу оговоримся, что исследование находится в самой начальной его фазе. Поэтому будут приведены весьма предварительные результаты.

Обучающая и тестовая выборки формируются искусственно – случайным образом на выбранном участке координатной плоскости разбрасываются частицы. Затем для случайного числа случайных частиц из них (выбранных как целевые) рассчитываются проекции сил на оси координат со стороны частиц окружающих данную целевую и попадающих в квадрат выбранного размера. Для каждой целевой частицы строится также матрица-дескриптор. Таким образом кортеж (матрица-дескриптор, сила вдоль OX , сила вдоль OY) представляет собой один элемент выборки. Таких элементов формируется нужное количество – обычно 50000, из которых 40000 принадлежит обучающей выборке, а 10000 тестовой.

На данный момент были проведены эксперименты только с сетью с архитектурой, изображенной на рис. 2 с тремя различными плотностями частиц. На тестовой выборке контролируем качество с помощью простейшей метрики – процентом угаданных классов. При этом считаем класс угаданным, если он угадан точно одновременно для обеих проекций силы (фактически мы обучаем две сети – для двух проекций силы). Лучший результат исследованных случаев 71%.

Заключение

В работе рассмотрен подход к восстановлению сил межатомного взаимодействия с помощью конволюционной нейронной сети в модельной системе двумерного газа точечных бесструктурных частиц.

Отметим, что на данный момент точность сети невысока и ее повышение является приоритетом дальнейших исследований. Первым шагом на этом пути будет повышение объема входных данных сети – увеличение размера матрицы-дескриптора. На следующих этапах будет повышена глубина сети до размера архитектуры *AlexNet*.

Список источников

1. Daw Murray S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev. B*, 1984. Vol. 29.
2. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // *Phys. Rev. B*, 1989. Vol. 39.
3. Atomistic mechanism of graphene growth on a SiC substrate: Large-scale molecular dynamics simulations based on a new charge-transfer bond-order type potential / So Takamoto [et al.] // *Phys. Rev. B*, 2018. Vol. 97.
4. Behler J., Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces // *Phys. Rev. Lett.*, 2007. Vol. 98.
5. Schnet: A continuous-filter convolutional neural network for modeling quantum interactions / K. T. Schütt [et al.] // *Advances in Neural Information Processing Systems*. 2017 P. 992-1002.
6. Towards exact molecular dynamics simulations with machine-learned force fields / S. Chmiela [et al.] // *Nature Commun.*, 2018. Vol. 9. № 1. DOI : 10.1038/s41467-018-06169-2.
7. Deep Potential: a general representation of a many-body potential energy surface / J. Han, L. Zhang, R. Car, E. Weinan // *Commun. Comput. Phys.*, 2023. Vol. 18. P. 629-639.
8. Takamoto S., Izumi S., Li J. TeaNet: Universal neural network interatomic potential inspired by iterative electronic relaxations // *Computational Materials Science*, 2022. Vol. 207 № 5. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111280>.
9. The graph neural network model / F. Scarselli [et al.] // *IEEE Trans. Neural Netw.*, 2009. Vol.20. No. 1. P. 61-80.
10. Geometric deep learning: going beyond euclidean data / M. M Bronstein [et al.] // *IEEE Signal Process. Mag.*, 2017. Vol. 34. No.4. P. 18-42

11. Wolfram Mathematica: Современные технический вычисления : [веб-сайт]. Wolfram, 2022. URL : <https://www.wolfram.com/mathematica/>.