

УДК 004.896

ГРАФОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ПОЛНОЙ ЭНЕРГИИ

Левенец М.Е. (ВЦ ДВО)

Научный руководитель – доктор физ.-мат. наук, старший научный сотрудник

Чибисов А.Н. (ВЦ ДВО)

Введение. Прогнозирование свойств материалов представляет собой важный аспект материаловедения и играет ключевую роль в разработке и усовершенствовании новых материалов для различных областей применения. Значительная часть этих исследований направлена на поиск наиболее стабильных кристаллических структур, поскольку их стабильность во многом определяет применимость материала в реальных условиях эксплуатации. Традиционно учёные полагались на вычислительные методы, такие как теория функционала плотности, которая позволяет рассчитать электронную структуру материалов путём итеративного решения уравнений Кона-Шэма для систем с большим количеством электронов. Хотя эти методы являются условно точными, такие расчёты требуют значительных вычислительных ресурсов. Модели машинного обучения способны аппроксимировать сложные квантово-механические вычисления с гораздо меньшими вычислительными затратами и ускорить поиск стабильных кристаллических структур.

Основная часть. С помощью моделей машинного обучения [1-3], обученных на наборе данных Jarvis-DFT [4] рассматривается возможность аппроксимации DFT вычислений полной энергии. Архитектура нейронной сети относится к графовым, включает свёрточные слои внимания и глобальный узел для учёта дальнего взаимодействия. Графовые нейронные сети [5-6] предназначены для обработки данных, структурированных в виде графов, путем итеративного обновления представлений узлов на основе их локальных представлений. В контексте кристаллических структур каждый узел на графике представляет атом, а ребра представляют взаимодействия между ними, такие как связи или пространственная близость.

Основа используемого здесь метода передачи сообщений состоит в обновлении представлений узлов в зависимости от их окружения. В этом подходе представления каждого узла обновляются с помощью серии шагов передачи сообщений. Изначально каждый атом характеризуется признаками, идентифицирующими его разновидность, включая атомный номер, атомную массу, количество валентных электронов, тип (например, металл, лантаноид, актинид) и средний ионный радиус, в последующих шагах передачи сообщений признаки атома обновляются на основе сообщений от его соседей и его текущего состояния.

В данной работе был использован механизм агрегации с вниманием, который использует функцию-шлюз в виде многослойного персептрона для присвоения коэффициентов внимания сообщениям от соседних узлов. Этот механизм позволяет сети по-разному оценивать вклад различных соседей в зависимости от их значимости для обновления текущего узла.

После нескольких уровней передачи сообщений с независимыми весами узлы собирают информацию об их локальных окрестностях (узлах-соседах) в пределах определенного радиуса. Чтобы создать векторное представление фиксированной длины для всего графа, то есть всей ячейки, обновленные вложения узлов объединяются с помощью метода, основанного на Deep Sets [7]. Это векторное представление объединяет структурную и химическую информацию о кристалле, которая затем передается в другую модель машинного обучения на основе нейронной сети прямого распространения для прогнозирования скалярных свойств материала, таких как полная энергия в данном случае.

Выводы. Обученная GCNN модель показывает погрешность 0.11 э/В на тестовой выборке и демонстрирует потенциальное поле для дальнейшего развития.

Список использованных источников:

1. J. Schmidt et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science // *npj Computational Materials*. - 2019. - №1. - С. 83.
2. A. Zunger Inverse design in search of materials with target functionalities // *Nature Reviews Chemistry*. - 2018. - №4. - С. 121.
3. L. Ward et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials // *npj Computational Materials*. - 2016. - №1. - С. 280.
4. K. Choudhary et al. The joint automated repository for various integrated simulations (JARVIS) for data-driven materials design // *Computational Materials*. - 2019. - №1. - С. 173.
5. Z. Wu et al. A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks // *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*. - 2021. - №32. - С. 280.
6. Graph Attention Networks // Arxiv URL: <https://arxiv.org/abs/1710.10903> (дата обращения: 08.02.2025).
7. M. Zaheer et al. Deep sets // *Advances in Neural Information Processing Systems*. - 2017. - №3391. - С. 280.

Автор _____ Левенец М.Е.
Научный руководитель _____ Чибисов А.Н.