

Properties of molecular crystals using machine learning potentials

Candidato:
Mariano Mollo

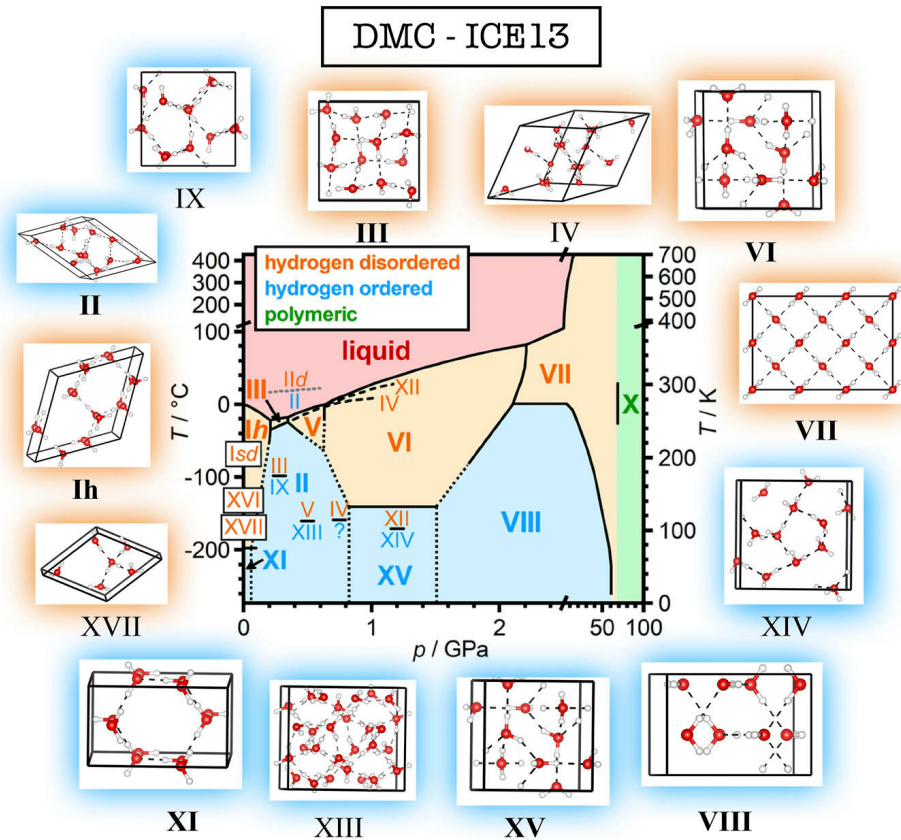
Relatori:
Prof. Dario Alfè,
Prof. Andrea Zen

Università degli Studi di Napoli Federico II
Dipartimento di Fisica Ettore Pancini

17 ottobre 2024

Il ghiaccio e i suoi polimorfi

- Classe dei cristalli molecolari
- Importanza di studiare le diverse fasi cristalline del ghiaccio
- Difficoltà: caratterizzare le componenti di interazione, Coulomb, van der Waals
- Spesso i polimorfi differiscono solo per piccole differenze di energia (≈ 1 kJ/mol)
- Per caratterizzare il diagramma T-P, sono importanti le proprietà dinamiche.



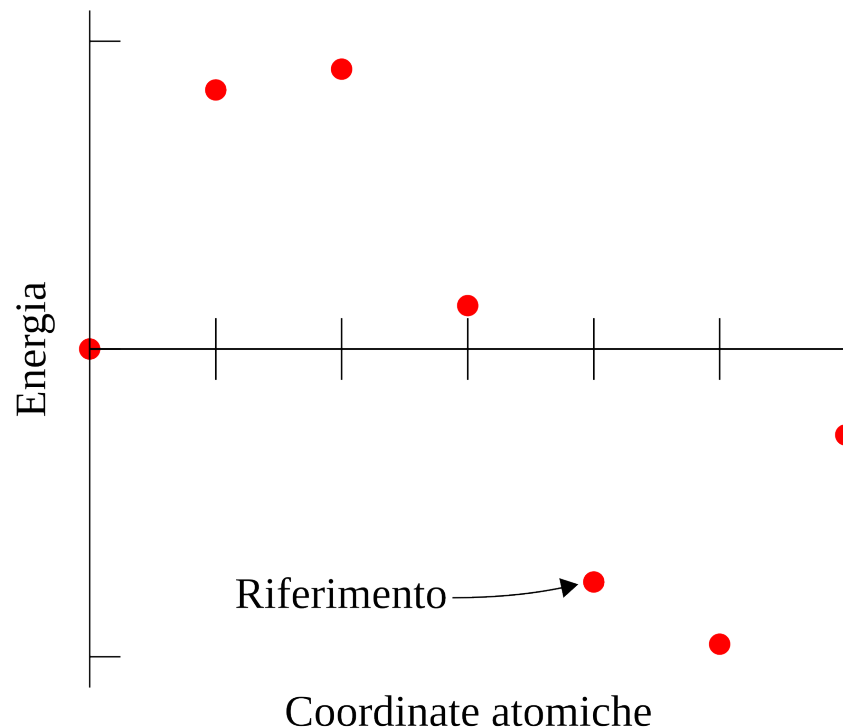
Della Pia et al. 2022

Potenziali tradizionali e machine learning

- Compromesso tra costo e accuratezza (DMC, CC, DFT, FF)
- Esempio: trovare il cristallo più stabile tramite simulazioni di MD seguendo la PES, che ha a che fare con le posizioni degli ioni
- Metodi ML per modellare la PES racchiudendo nell'addestramento il ruolo degli elettroni (necessario grande numero di campioni)

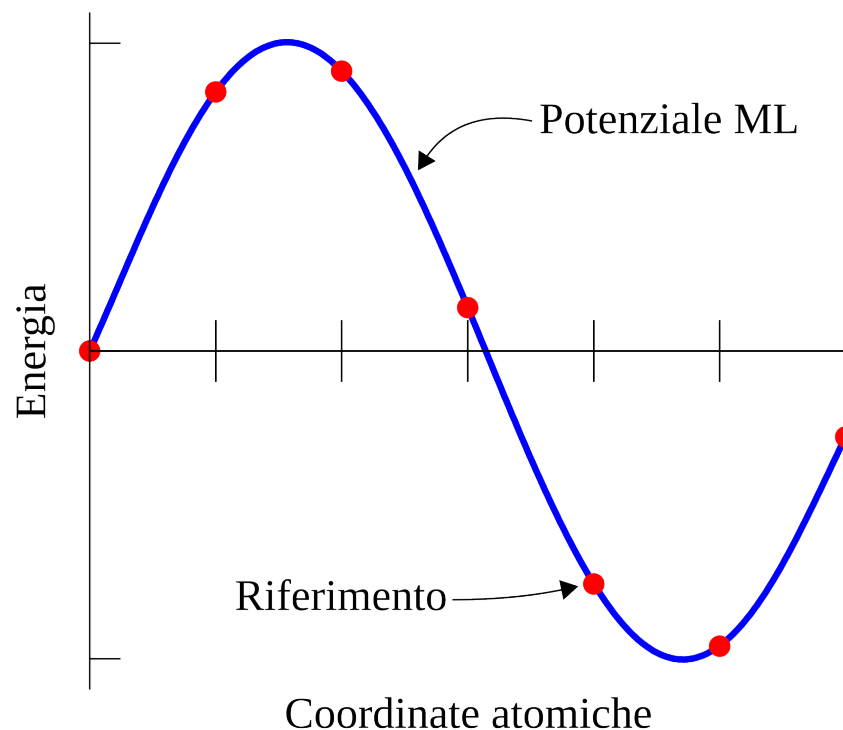
Potenziali tradizionali e machine learning

- Compromesso tra costo e accuratezza (DMC, CC, DFT, FF)
- Esempio: trovare il cristallo più stabile tramite simulazioni di MD seguendo la PES, che ha a che fare con le posizioni degli ioni
- Metodi ML per modellare la PES racchiudendo nell'addestramento il ruolo degli elettroni (necessario grande numero di campioni)



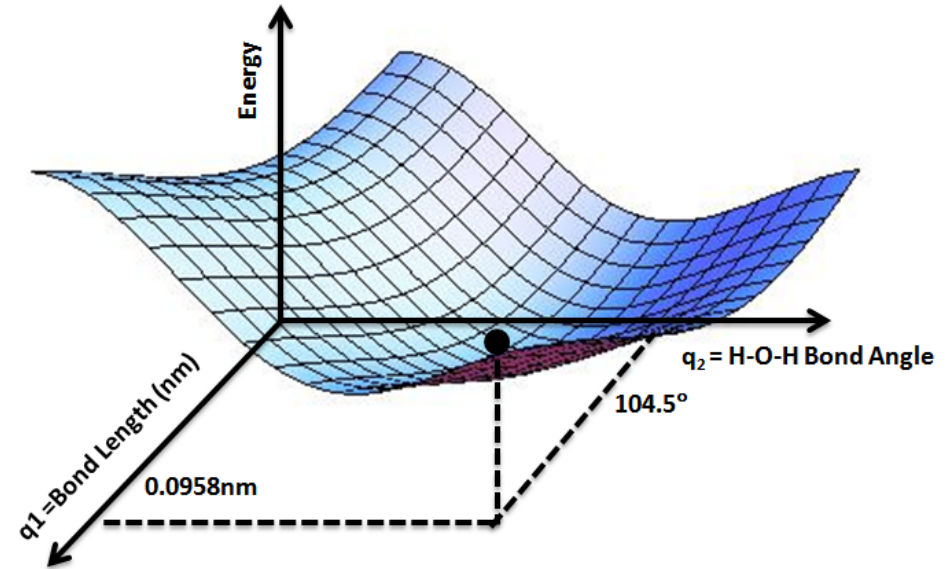
Potenziali tradizionali e machine learning

- Compromesso tra costo e accuratezza (DMC, CC, DFT, FF)
- Esempio: trovare il cristallo più stabile tramite simulazioni di MD seguendo la PES, che ha a che fare con le posizioni degli ioni
- Metodi ML per modellare la PES racchiudendo nell'addestramento il ruolo degli elettroni (necessario grande numero di campioni)



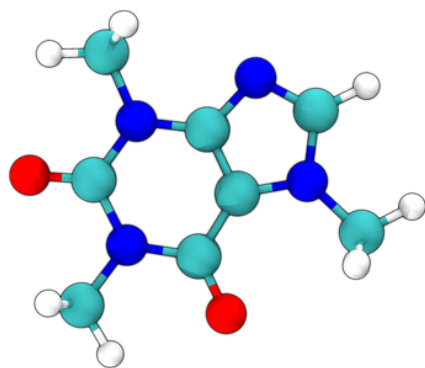
Potenziali tradizionali e machine learning

- Compromesso tra costo e accuratezza (DMC, CC, DFT, FF)
- Esempio: trovare il cristallo più stabile tramite simulazioni di MD seguendo la PES, che ha a che fare con le posizioni degli ioni
- Metodi ML per modellare la PES racchiudendo nell'addestramento il ruolo degli elettroni (necessario grande numero di campioni)

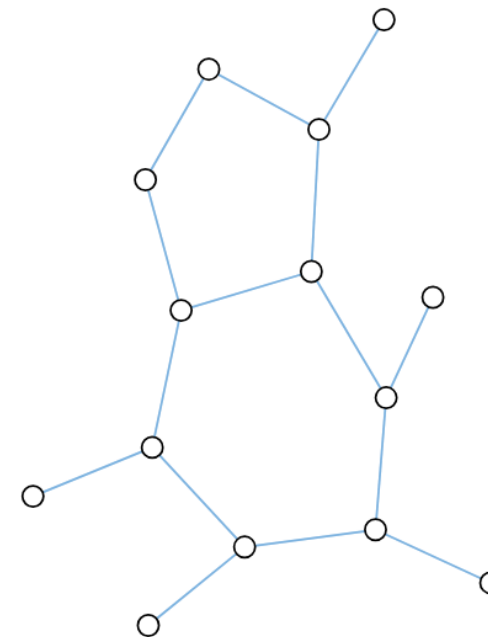
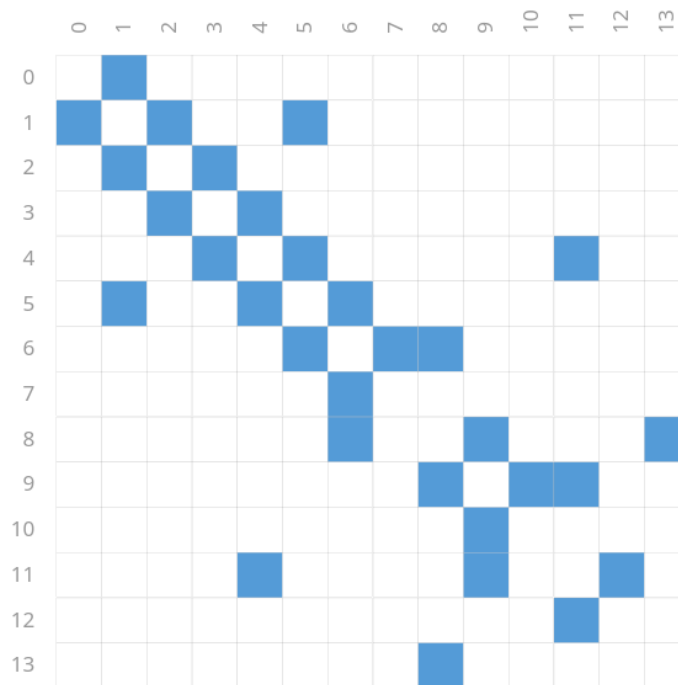


AimNature, CC BY-SA 3.0, via Wikimedia Commons

L'architettura di MACE



Caffeina



MACE è una rete neurale a grafo di recente sviluppo, che codifica le informazioni a molti corpi della geometria atomica.

Modelli di MACE

Ci sono tre modelli base di MACE, che variano in base alla quantità di parametri che costituiscono il modello, e uno specializzato fornito dall'esterno per la mia tesi:

- MACE-MP-0¹ (pre-addestrato su alcuni materiali, nelle varianti small, medium, large)
- MACE-ICE13-1 (adattato in particolare al ghiaccio, per gentile concessione di Flaviano Della Pia)



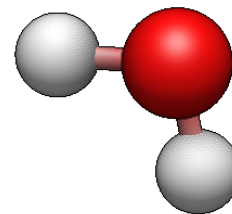
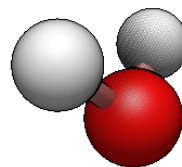
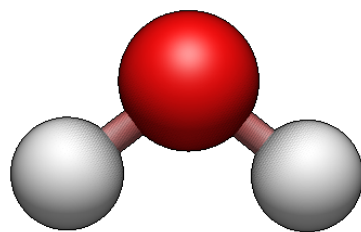
¹Batatia et al. 2023, A foundation model for atomistic materials chemistry

Risultati

Test su sistemi semplici

Si sono testate inizialmente le performance di MACE-MP-0 con le seguenti task su sistemi di piccola scala, il monomero e il dimerico d'acqua:

- Ottimizzazione della geometria dei sistemi atomici
- Proprietà vibrazionali ed energia di punto zero armoniche
- Energia di interazione del dimerico



Ottimizzazione della geometria

La procedura per ottimizzare la geometria degli atomi in un sistema richiede la corretta impostazione di alcuni parametri, come:

- il calcolatore e il tipo di dato numerico
- la geometria iniziale e le proprietà della cella
- l'algoritmo di ottimizzazione per trovare il minimo della PES
- la soglia di tolleranza delle forze residue su ciascun atomo a per terminare l'ottimizzazione:

$$\max_a |\vec{F}_a| < f_{\max}$$

Ottimizzazione della geometria

La procedura per ottimizzare la geometria degli atomi in un sistema richiede la corretta impostazione di alcuni parametri, come:

- il calcolatore e il tipo di dato numerico (MACE-MP-0 medium, float64)
- la geometria iniziale e le proprietà della cella
- l'algoritmo di ottimizzazione per trovare il minimo della PES
- la soglia di tolleranza delle forze residue su ciascun atomo a per terminare l'ottimizzazione:

$$\max_a |\vec{F}_a| < f_{\max}$$

Ottimizzazione della geometria

La procedura per ottimizzare la geometria degli atomi in un sistema richiede la corretta impostazione di alcuni parametri, come:

- il calcolatore e il tipo di dato numerico (MACE-MP-0 medium, float64)
- la geometria iniziale e le proprietà della cella ($\widehat{\text{HOH}} = 90^\circ$ nel vuoto)
- l'algoritmo di ottimizzazione per trovare il minimo della PES
- la soglia di tolleranza delle forze residue su ciascun atomo a per terminare l'ottimizzazione:

$$\max_a |\vec{F}_a| < f_{\max}$$

Ottimizzazione della geometria

La procedura per ottimizzare la geometria degli atomi in un sistema richiede la corretta impostazione di alcuni parametri, come:

- il calcolatore e il tipo di dato numerico (MACE-MP-0 medium, float64)
- la geometria iniziale e le proprietà della cella ($\widehat{\text{HOH}} = 90^\circ$ nel vuoto)
- l'algoritmo di ottimizzazione per trovare il minimo della PES (BFGS)
- la soglia di tolleranza delle forze residue su ciascun atomo a per terminare l'ottimizzazione:

$$\max_a |\vec{F}_a| < f_{\max}$$

Ottimizzazione della geometria

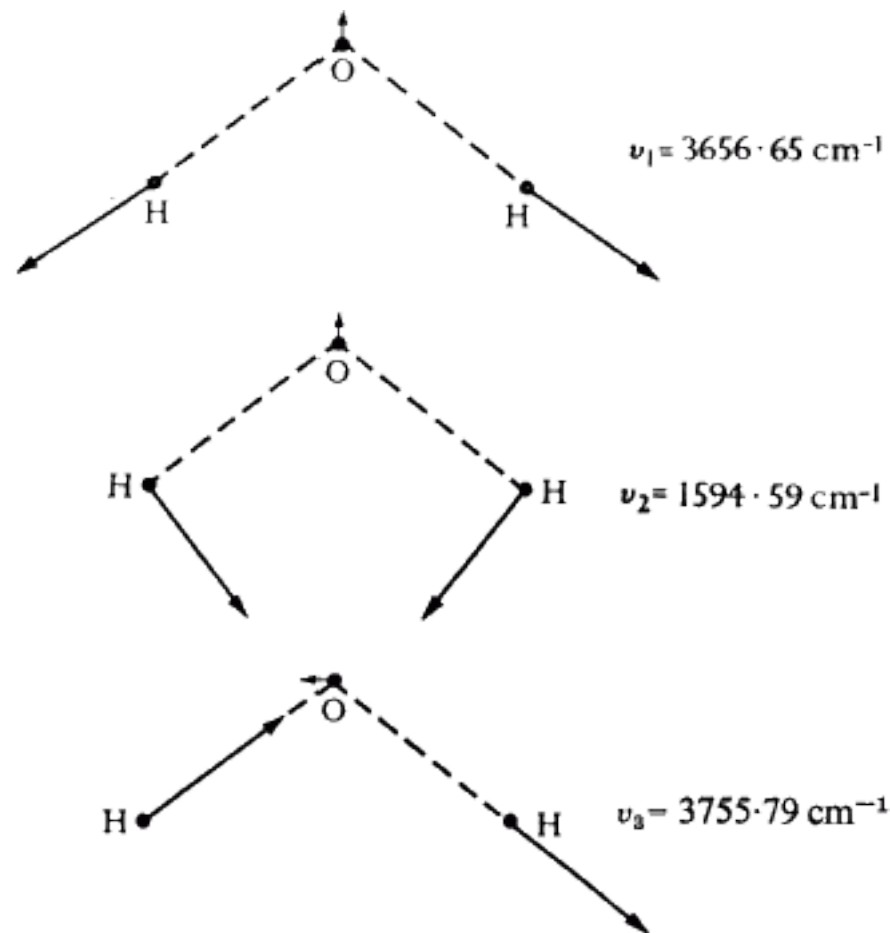
La procedura per ottimizzare la geometria degli atomi in un sistema richiede la corretta impostazione di alcuni parametri, come:

- il calcolatore e il tipo di dato numerico (MACE-MP-0 medium, float64)
- la geometria iniziale e le proprietà della cella ($\widehat{\text{HOH}} = 90^\circ$ nel vuoto)
- l'algoritmo di ottimizzazione per trovare il minimo della PES (BFGS)
- la soglia di tolleranza delle forze residue su ciascun atomo a per terminare l'ottimizzazione:

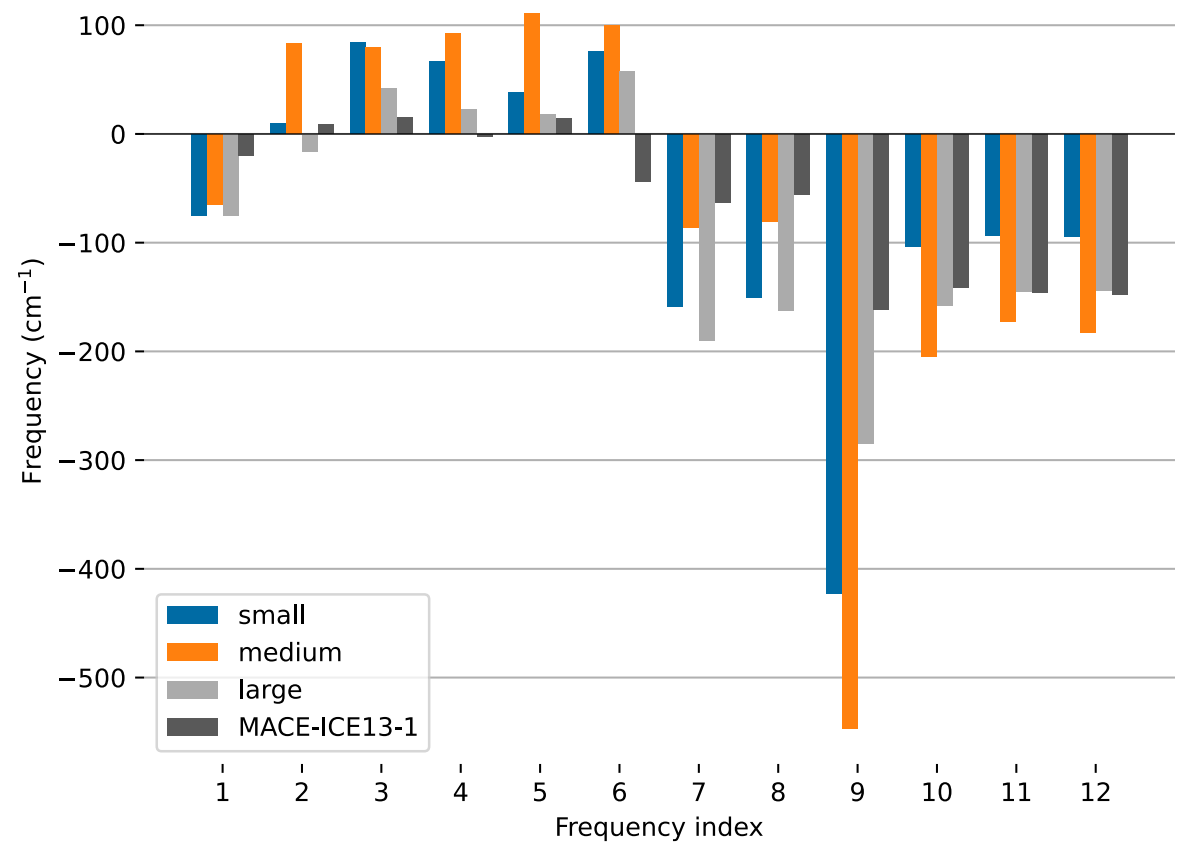
$$\max_a |\vec{F}_a| < f_{\text{max}} = 10^{-4} \text{ eV/\AA}$$

$$G(v_1, v_2, v_3) = \sum_{i=1}^3 \omega_i \left(v_i + \frac{1}{2} \right)$$

$$\text{ZPE} := G(0, 0, 0) = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)$$



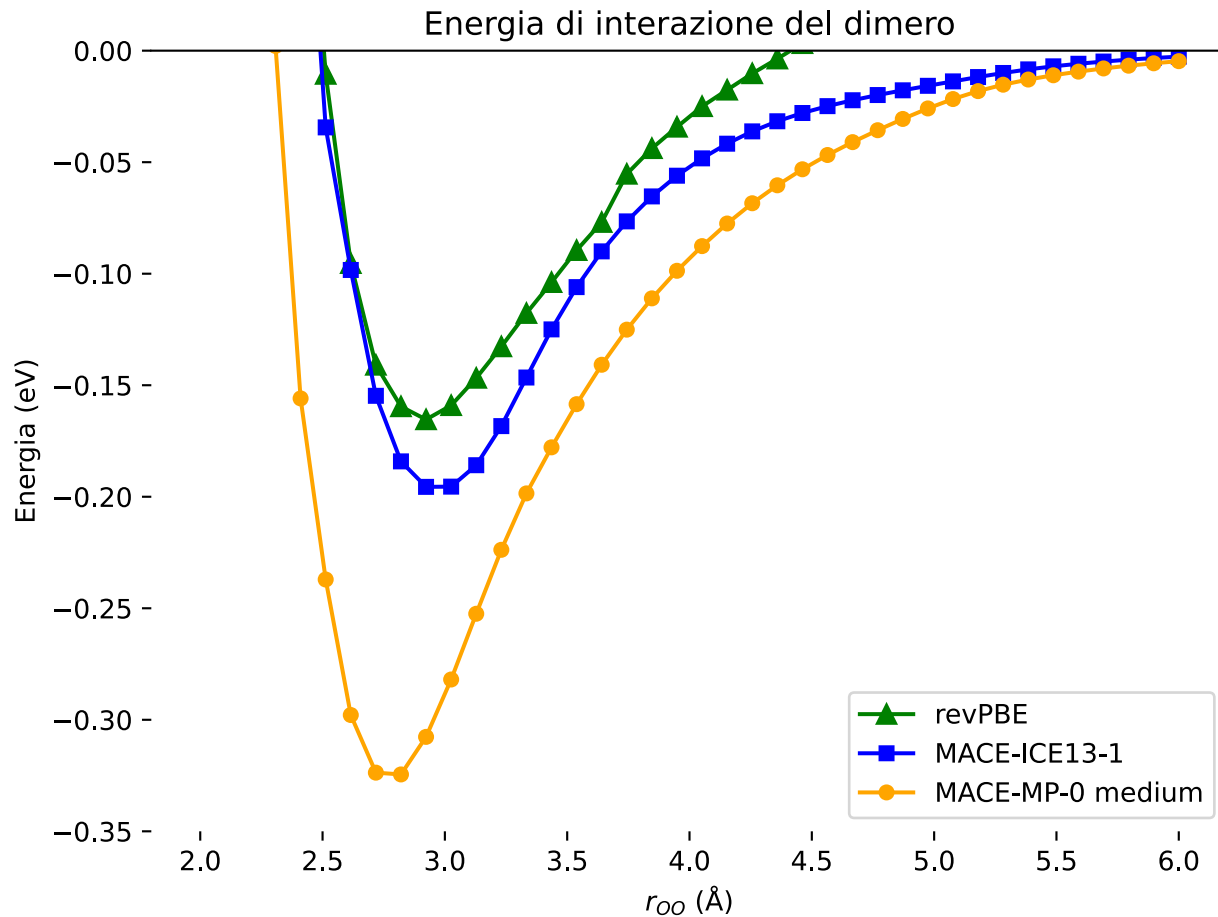
MACE-ICE13-1 meglio stima in generale le frequenze armoniche del dimero d'acqua.



Model	ZPE (eV)	Error
Reference	1.264	0.000
ICE13-1	1.218	-0.046
small	1.213	-0.051
medium	1.210	-0.054
large	1.200	-0.064

Scarto delle frequenze armoniche del dimero rispetto alla
referenza

Energia di interazione



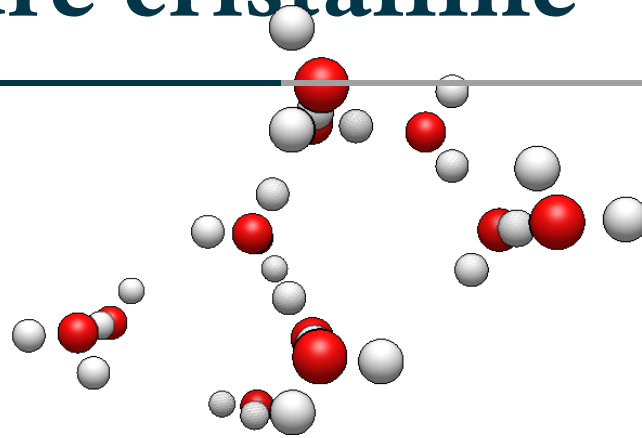
L'energia di interazione si calcola come:

$$\Delta E_2 := E_2 - 2E_1$$

MACE-MP-0 non ha soddisfatto le nostre necessità.

Abbiamo sviluppato il modello fine-tuned MACE-ICE13-1.

Strutture cristalline

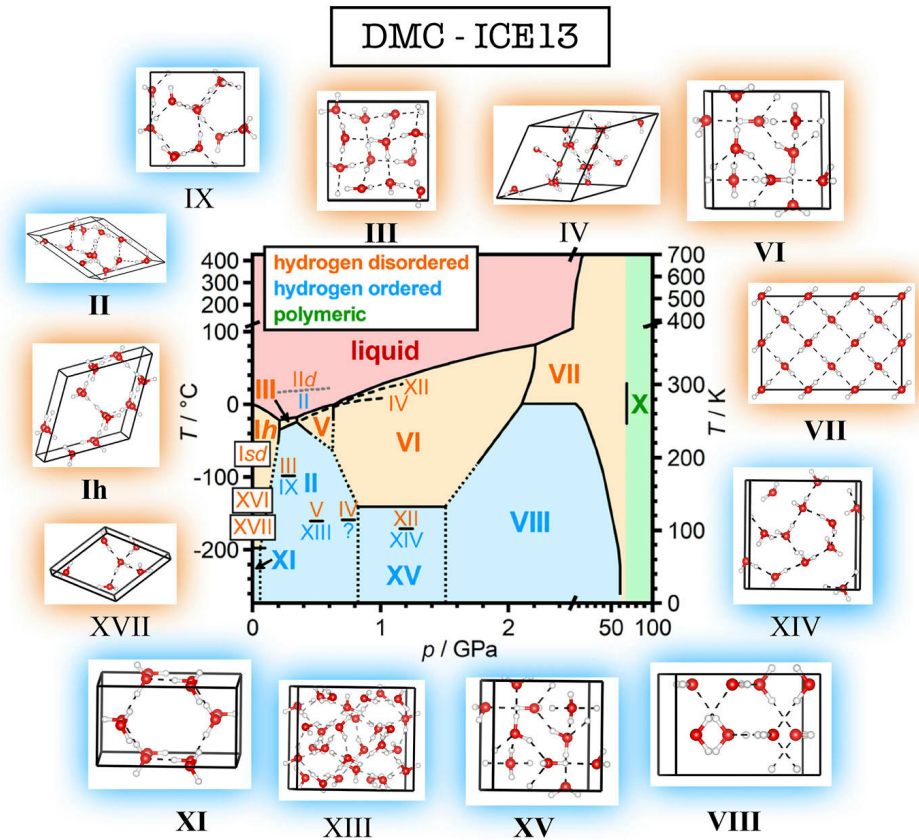


Polimorfi delle strutture cristalline

Si stimano le energie di reticolo a $T = 0$, quantità di interesse per la distinzione dei polimorfi.

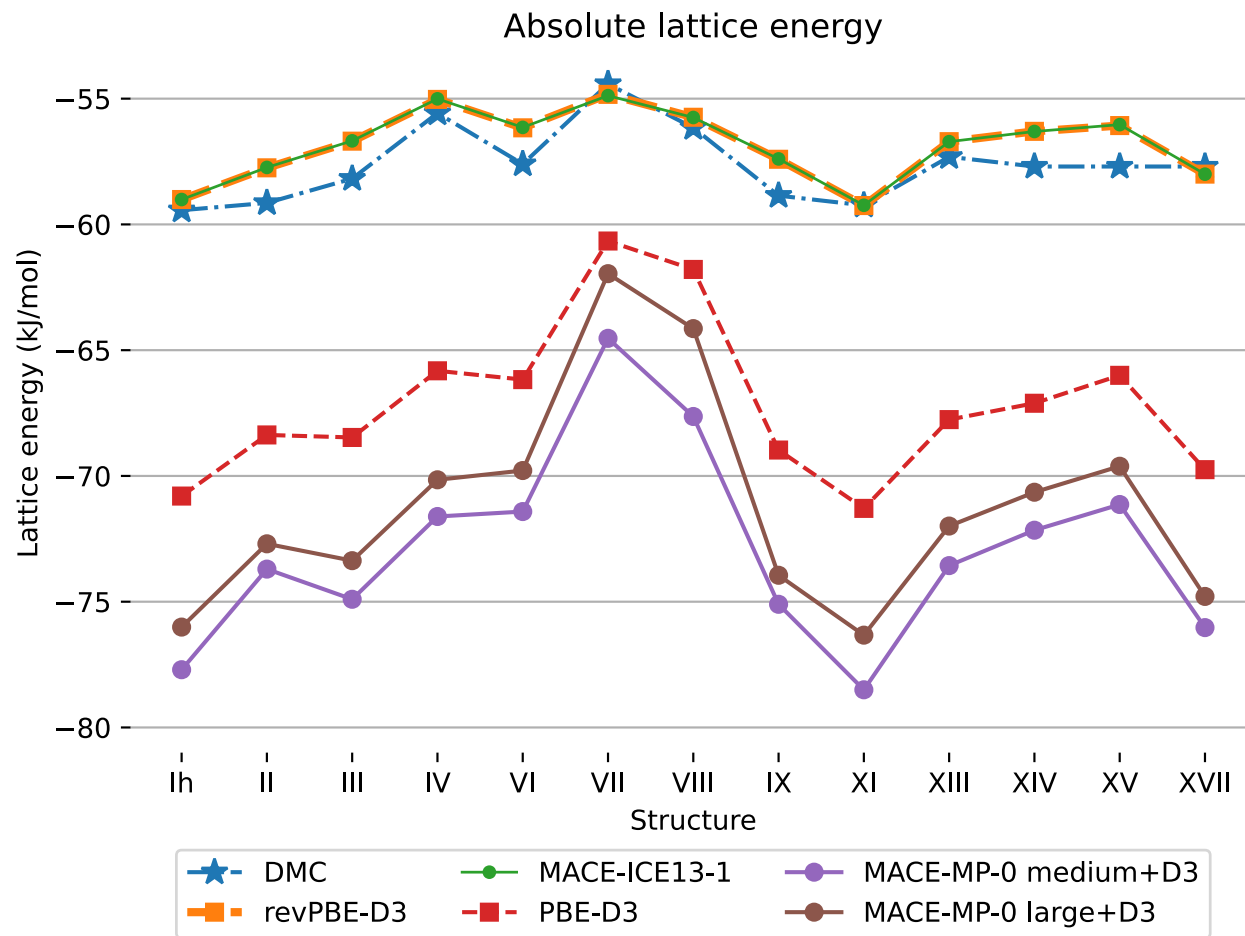
I metodi Diffusion Monte Carlo (DMC) restituiscono le quantità più accurate per le energie.

Tra i funzionali DFT, revPBE-D3 restituisce le proprietà di struttura e dinamiche più accurate del ghiaccio Ih. Su questo è stato addestrato MACE-ICE13-1.



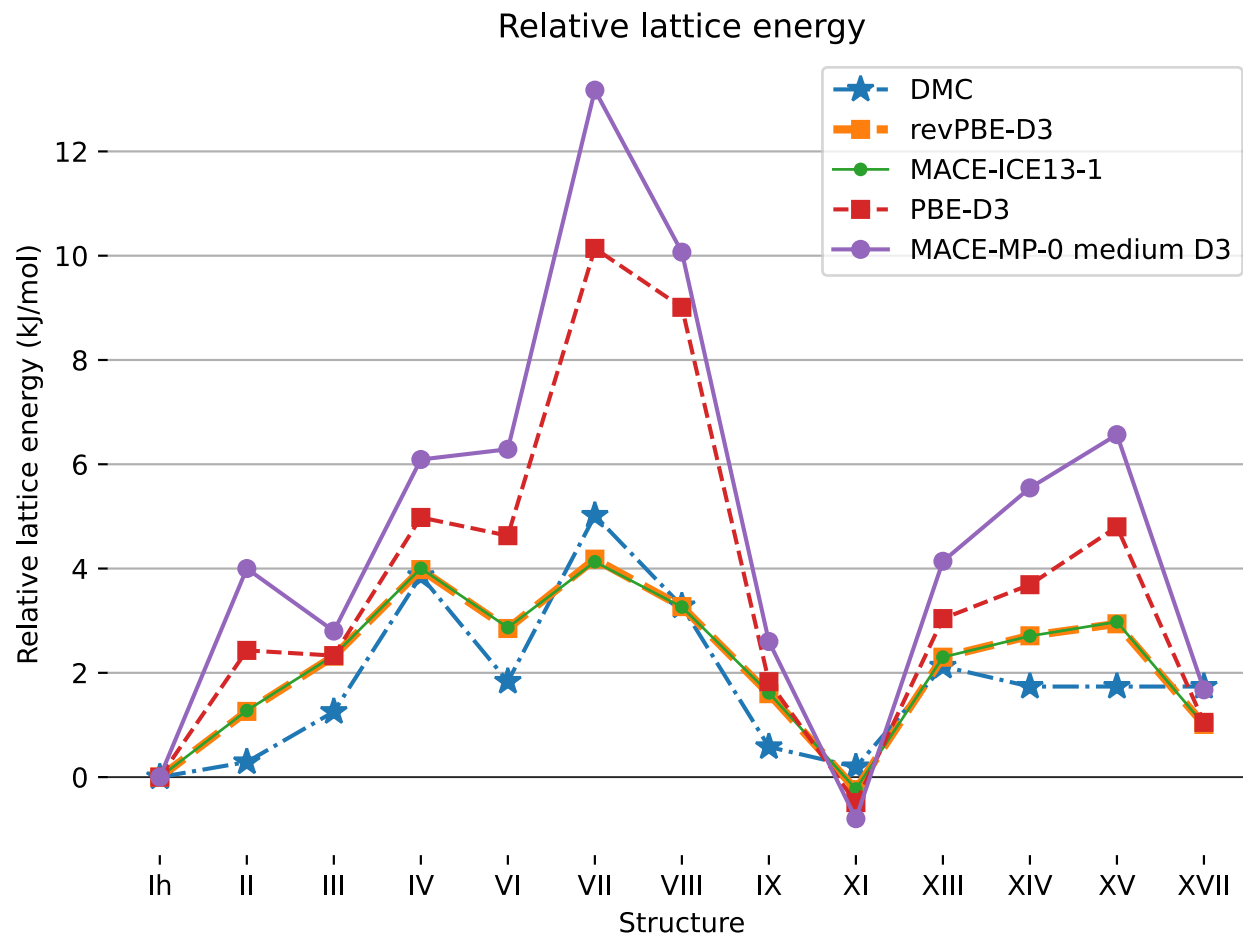
Della Pia et al. 2022

Energia di reticolo assoluta

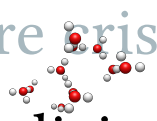


$$E_{\text{lattice}} := E_{\text{crystal}} - E_{\text{gas}}$$

$$\text{MAE} = 0.90 \text{ kJ/mol}$$

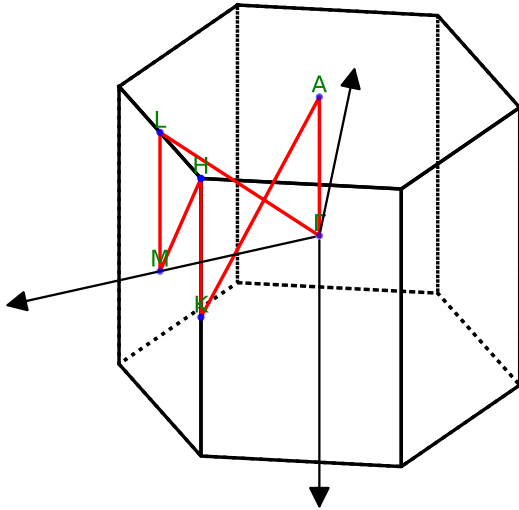


$$\Delta E_{\text{lattice}}^x := E_{\text{lattice}}^x - E_{\text{lattice}}^{\text{Ih}}$$



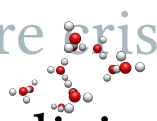
Dispersione dei fononi

Per il ghiaccio Ih, il polimorfo a condizioni ambiente, è stata calcolata la dispersione dei modi normali del cristallo, che rappresentano oscillazioni collettive delle particelle nel sistema con frequenza $\omega_{\vec{q},s}$, denominate *fononi*.



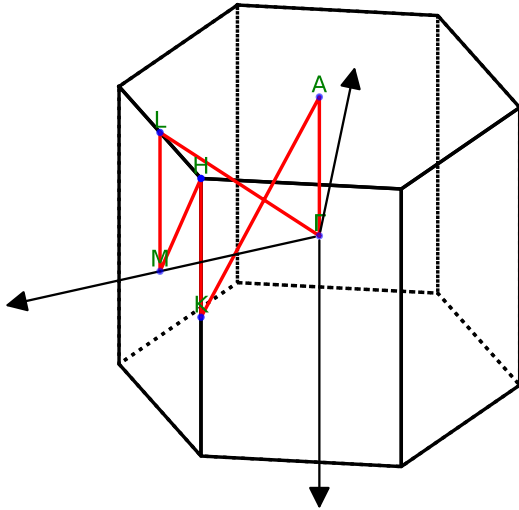
$$D(\vec{q}) := \frac{1}{M} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j^0} \Phi(\vec{r}_j^0)$$

$$\omega^2 \vec{\varepsilon} = D(\vec{q}) \cdot \vec{\varepsilon}$$



Dispersion dei fononi

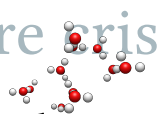
Per il ghiaccio Ih, il polimorfo a condizioni ambiente, è stata calcolata la dispersione dei modi normali del cristallo, che rappresentano oscillazioni collettive delle particelle nel sistema con frequenza $\omega_{\vec{q},s}$, denominate *fononi*.



$$D(\vec{q}) := \frac{1}{M} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j^0} \Phi(\vec{r}_j^0)$$

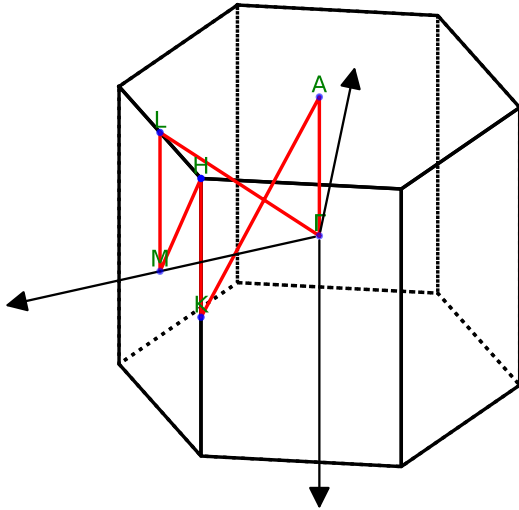
Matrice dinamica

$$\omega^2 \vec{\varepsilon} = D(\vec{q}) \cdot \vec{\varepsilon}$$



Dispersione dei fononi

Per il ghiaccio Ih, il polimorfo a condizioni ambiente, è stata calcolata la dispersione dei modi normali del cristallo, che rappresentano oscillazioni collettive delle particelle nel sistema con frequenza $\omega_{\vec{q},s}$, denominate *fononi*.

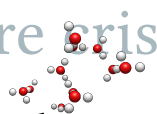


$$D(\vec{q}) := \frac{1}{M} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j^0} \Phi(\vec{r}_j^0)$$

Matrice dinamica

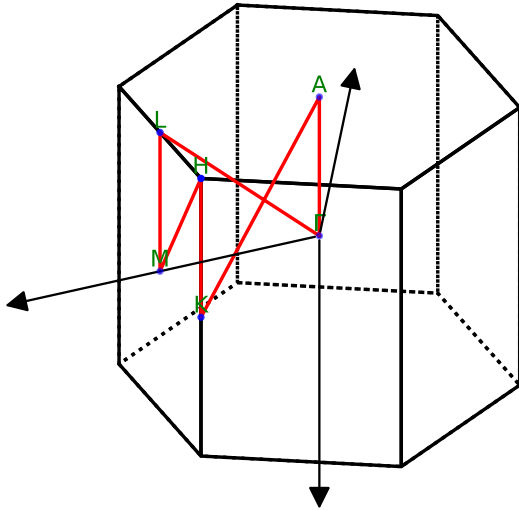
$$\omega^2 \vec{\varepsilon} = D(\vec{q}) \cdot \vec{\varepsilon}$$

Matrice delle costanti di forza



Dispersion dei fononi

Per il ghiaccio Ih, il polimorfo a condizioni ambiente, è stata calcolata la dispersione dei modi normali del cristallo, che rappresentano oscillazioni collettive delle particelle nel sistema con frequenza $\omega_{\vec{q},s}$, denominate *fononi*.



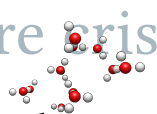
Vettore d'onda

$$D(\vec{q}) := \frac{1}{M} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j^0} \Phi(\vec{r}_j^0)$$

Matrice dinamica

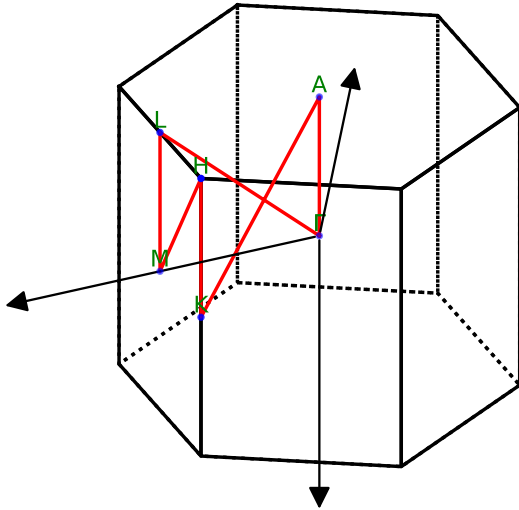
$$\omega^2 \vec{\varepsilon} = D(\vec{q}) \cdot \vec{\varepsilon}$$

Matrice delle costanti di forza



Dispersion dei fononi

Per il ghiaccio Ih, il polimorfo a condizioni ambiente, è stata calcolata la dispersione dei modi normali del cristallo, che rappresentano oscillazioni collettive delle particelle nel sistema con frequenza $\omega_{\vec{q},s}$, denominate *fononi*.



Vettore d'onda

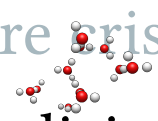
$$D(\vec{q}) := \frac{1}{M} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j^0} \Phi(\vec{r}_j^0)$$

Matrice dinamica

$$\omega^2 \vec{\varepsilon} = D(\vec{q}) \cdot \vec{\varepsilon}$$

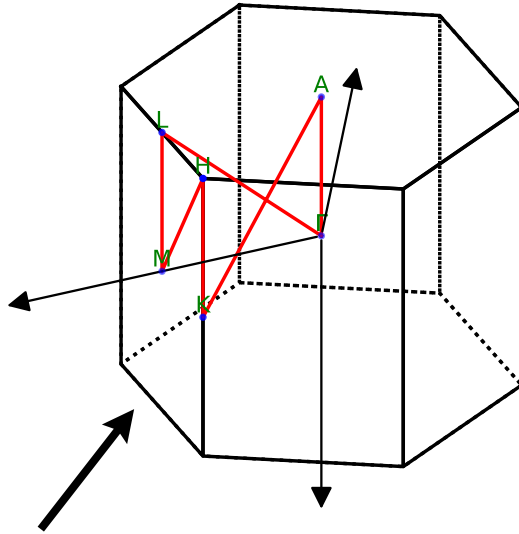
Vettore polarizzazione

Matrice delle costanti di forza



Dispersion dei fononi

Per il ghiaccio Ih, il polimorfo a condizioni ambiente, è stata calcolata la dispersione dei modi normali del cristallo, che rappresentano oscillazioni collettive delle particelle nel sistema con frequenza $\omega_{\vec{q},s}$, denominate *fononi*.



Per fare tutto ciò, si campionano i punti della zona di Brillouin.

Matrice dinamica

$$D(\vec{q}) := \frac{1}{M} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j^0} \Phi(\vec{r}_j^0)$$

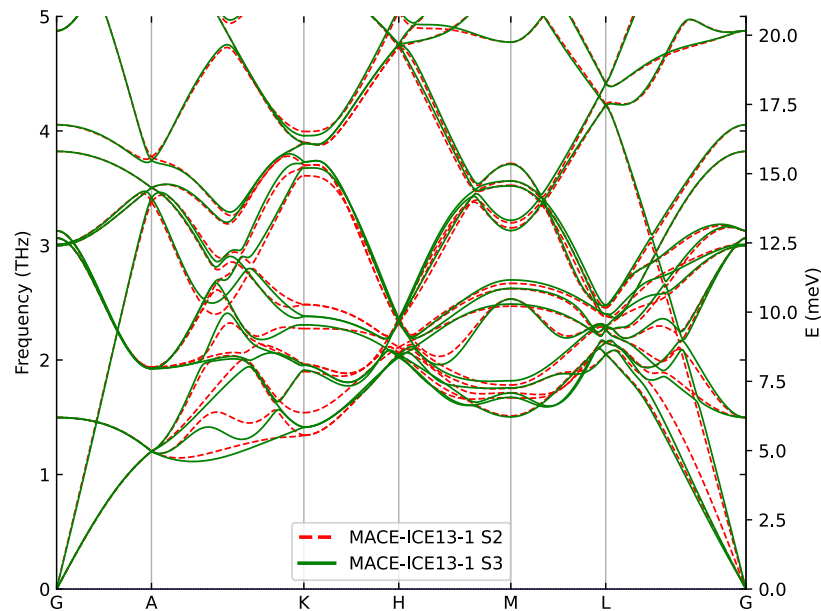
Vettore d'onda

$$\omega^2 \vec{\varepsilon} = D(\vec{q}) \cdot \vec{\varepsilon}$$

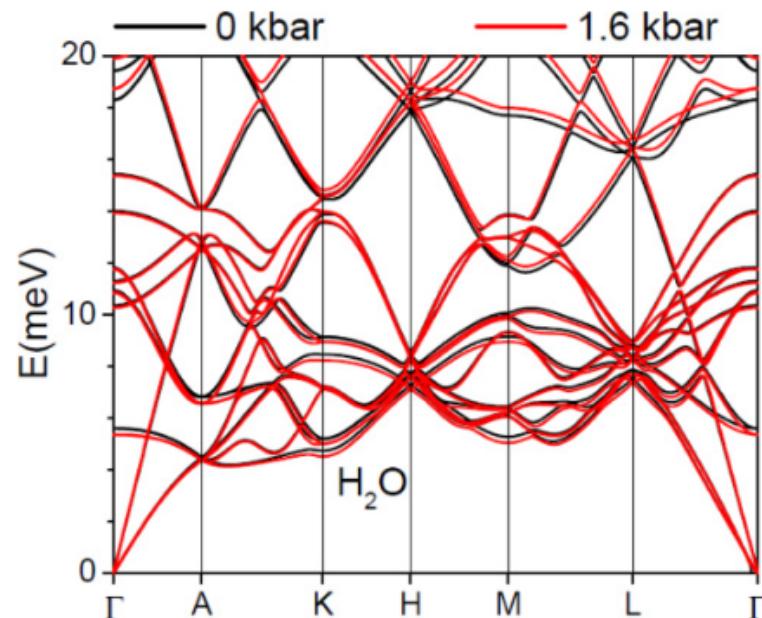
Vettore polarizzazione

Matrice delle costanti di forza

Dispersione dei fononi



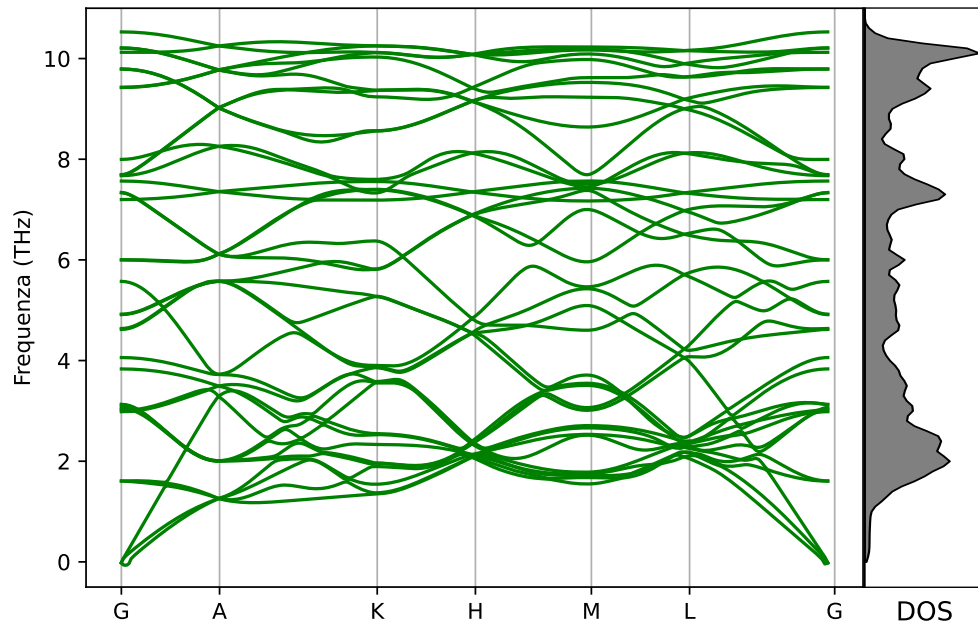
MACE-ICE13-1
Supercella $3 \times 3 \times 3$
 ≈ 5 min



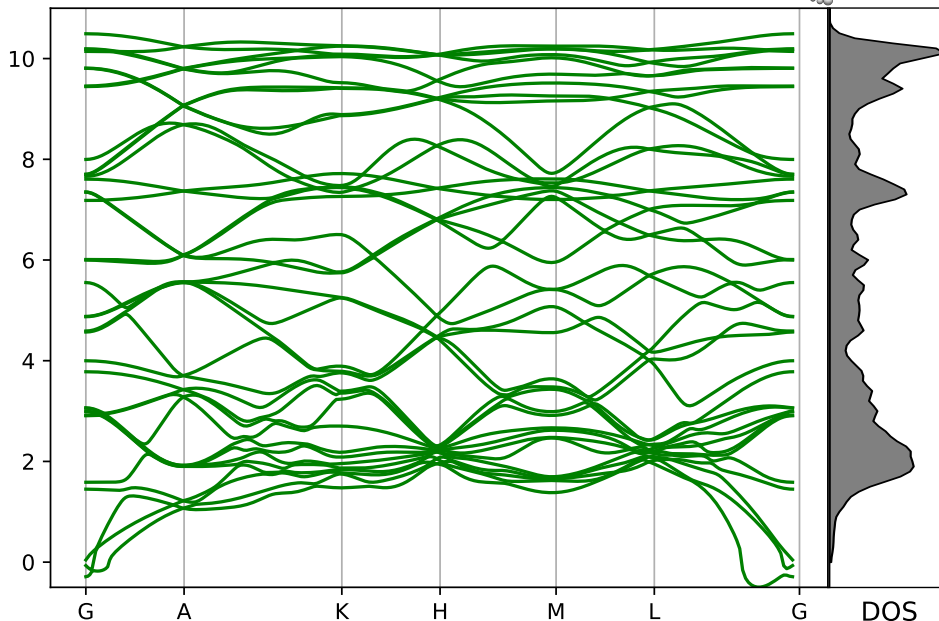
Reference DFT¹
Supercella $2 \times 2 \times 2$
k-points $4 \times 4 \times 4$

¹M. K. Gupta et al. 2018

Dispersione dei fononi

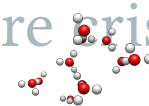


MACE-ICE13-1
Supercella $2 \times 2 \times 2$
 ≈ 2 min



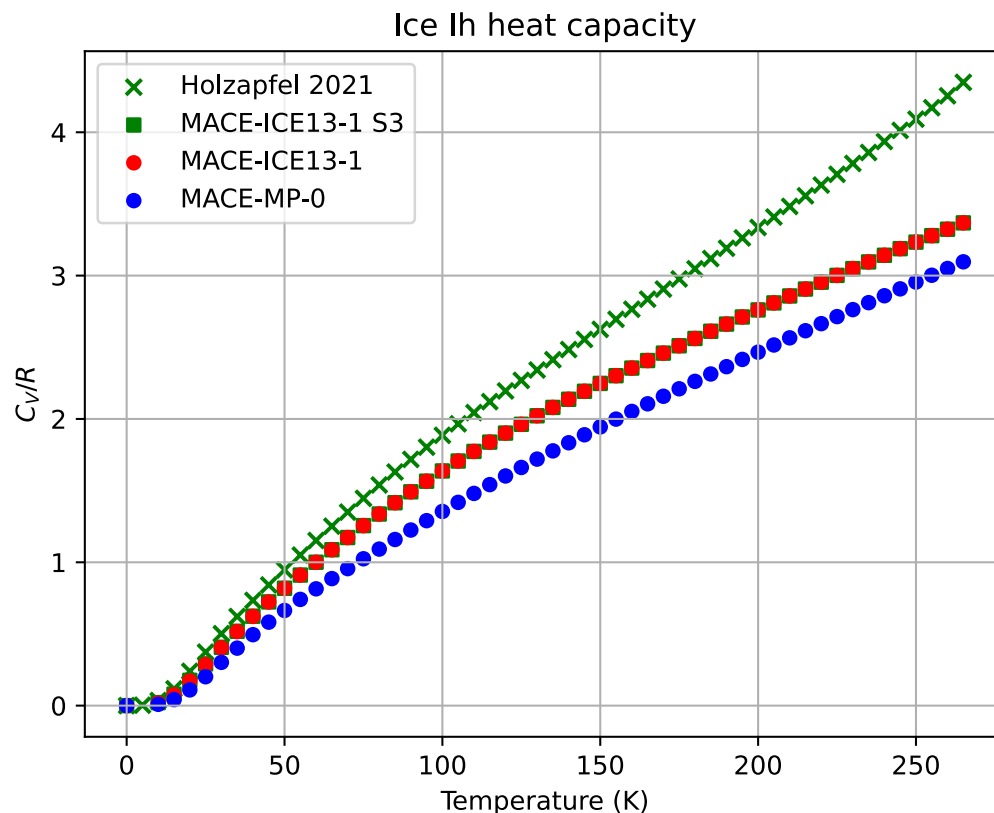
revPBE-D3
Supercella $2 \times 2 \times 2$
k-points $2 \times 2 \times 2$
 ≈ 5 h

k-points $4 \times 4 \times 4$ impiegherebbe ≈ 40 h, MACE 10^3 volte più rapido



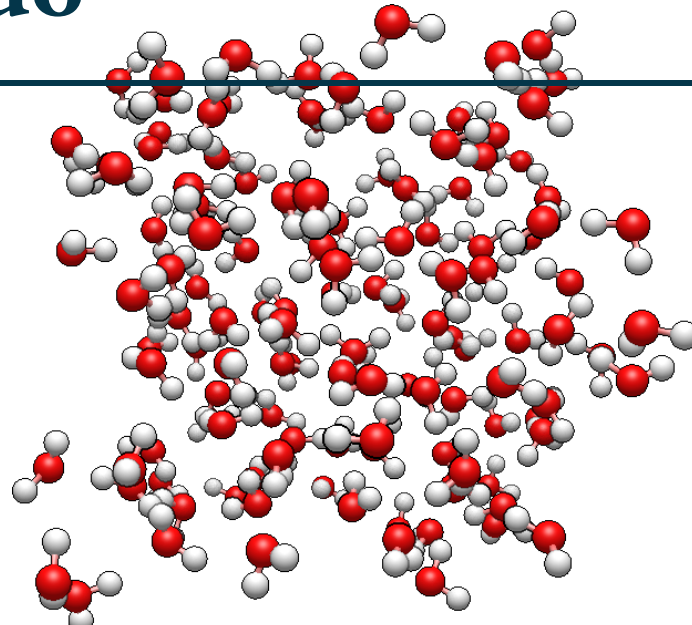
Lo studio delle frequenze armoniche ci permette di valutare alcune quantità fisiche di interesse, come ad esempio la capacità termica.¹

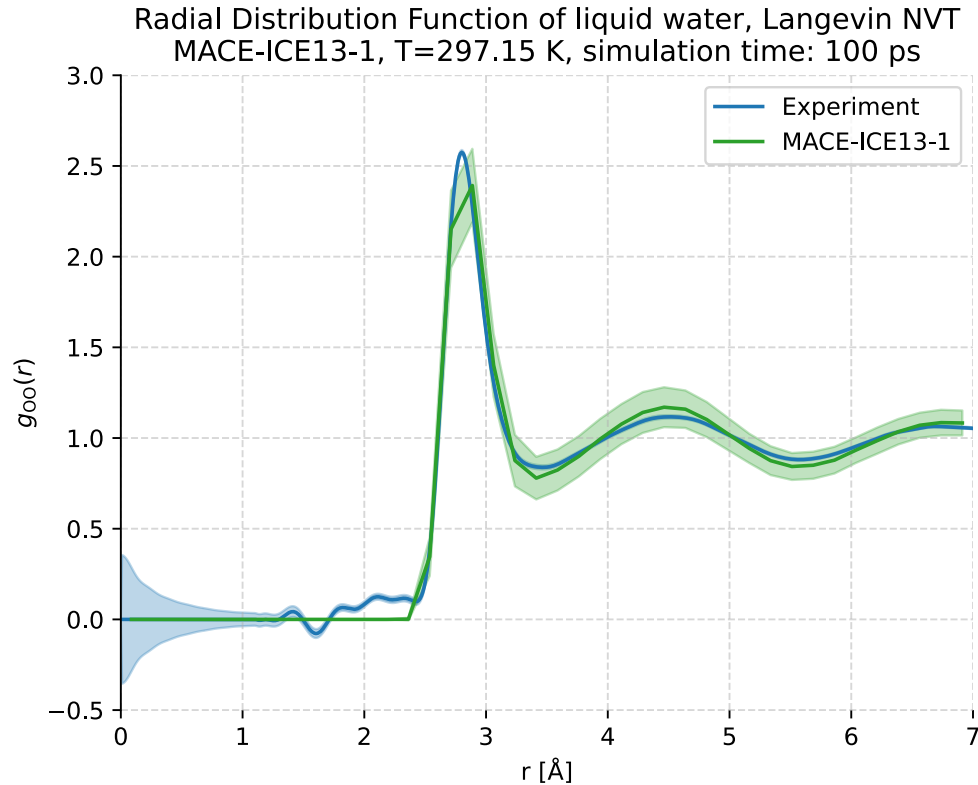
Il fine-tuning sulle caratteristiche del ghiaccio fornisce modelli più accurati nella caratterizzazione del materiale.



¹Holzapfel e Klotz 2021

Liquido





Si è infine esplorato la generalizzabilità del potenziale ML anche ad altri tipi di task, studiando la dinamica molecolare NVT del liquido e la RDF.¹

$\delta t = 0.5$ fs

#timestep: 200000

#molecole: 128

Tempo di esecuzione: 18h:48m

¹Skinner et al. 2013 X-Ray data

Conclusioni

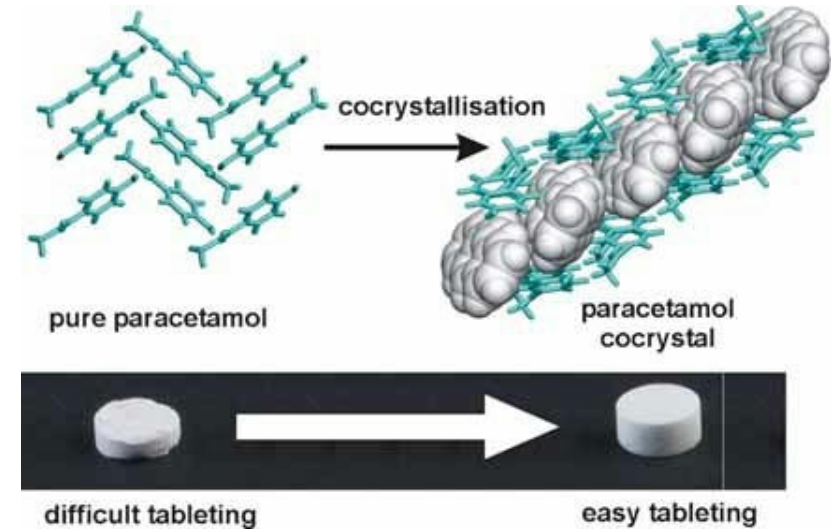
Grazie per l'attenzione!

Appendice

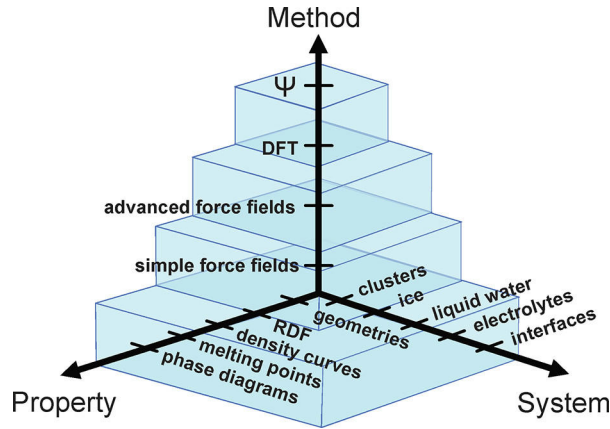
Importanza dei cristalli molecolari

I cristalli molecolari rappresentano un'area di studio significativa nella scienza dei materiali, per la loro importanza in campi come la farmaceutica, l'elettronica, le energie rinnovabili.

È importante il ruolo delle vibrazioni e delle interazioni van der Waals a molti corpi nelle proprietà coesive dei cristalli molecolari.



Diversi potenziali per le simulazioni

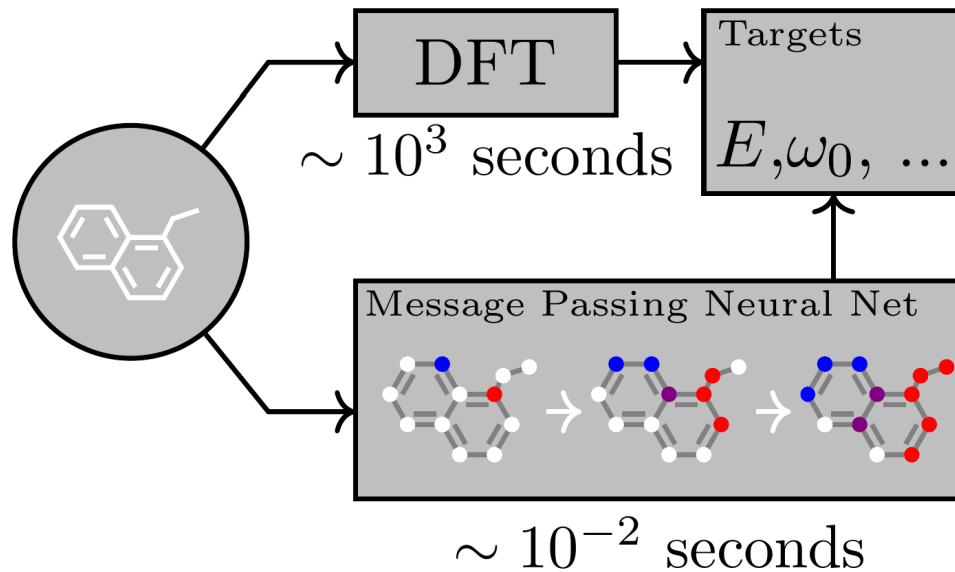


- Compromesso tra costo computazionale e accuratezza.
- Uso dei Machine Learning Potential (MLP) per modellare cristalli molecolari
- Catturano interazioni intermolecolari complesse con l'accuratezza degli approcci ab initio ma a un costo computazionale ridotto.

In questo lavoro abbiamo testato differenti modelli MLP per la stima di alcune proprietà dell'acqua, tra le quali energie di reticolo, dispersione dei fononi, e dinamica a temperatura finita.

Problematica e obiettivo

Ci sono difficoltà nei metodi tradizionali nel bilanciare l'accuratezza e il costo computazionale, come la Density Functional Theory (DFT), che pur essendo accurata, è costosa in termini di calcolo.



Vogliamo capire se è possibile migliorare la simulazione dei cristalli molecolari con accuratezza simile ai metodi ab initio ma a un costo computazionale molto più basso.

La teoria del funzionale densità (DFT) è una formulazione in principio esatta del problema elettronico a molti corpi della meccanica quantistica, in termini della densità dello stato fondamentale degli elettroni, invece che della funzione d'onda di stato fondamentale.

Una delle sue numerose applicazioni è la determinazione di proprietà strutturali ed elettroniche dei materiali nella fisica dello stato solido.

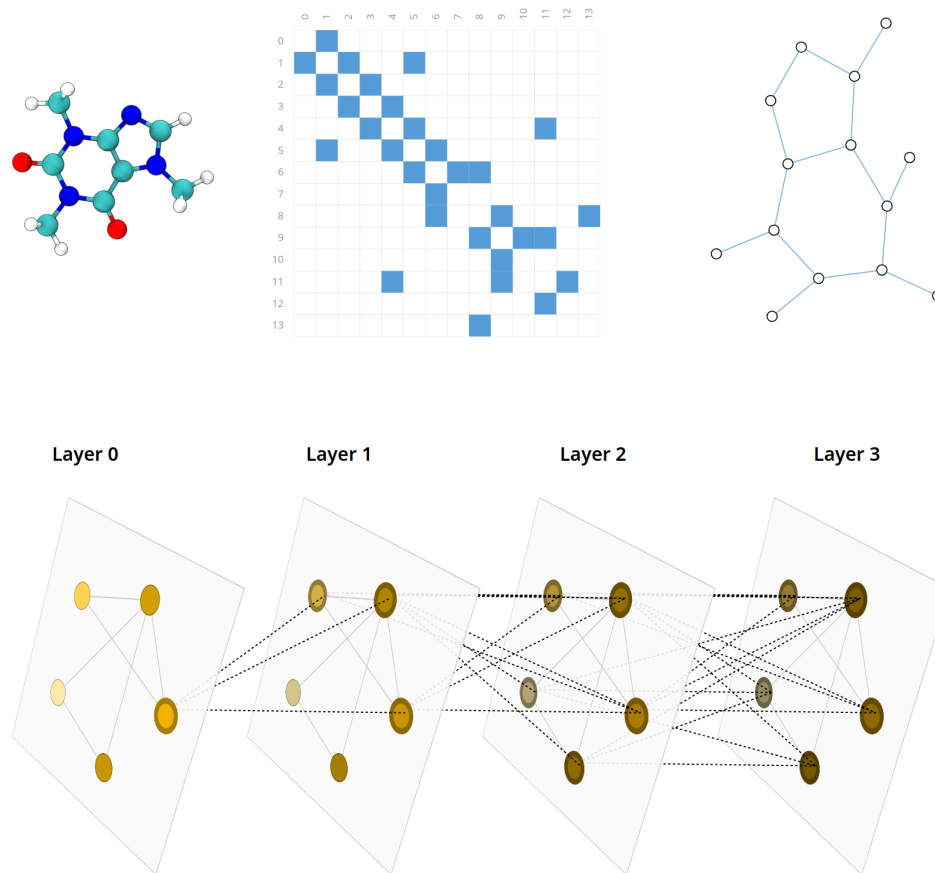
L'uso di questi metodi richiede l'individuazione del corretto funzionale di scambio e correlazione. È importante includere interazioni di van der Waals e di dispersione, allorquando non siano incluse nella teoria.

$$\hat{h}_{\text{KS}}[\rho](\vec{r})\psi_n(\vec{r}) = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{\text{KS}}[\rho](\vec{r}) \right] \psi_n(\vec{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\vec{r})$$

Reti neurali a grafo

- Ciascun nodo rappresenta un atomo
- Gli archi connettono i nodi se i corrispondenti atomi sono entro una data distanza tra loro
- Lo stato di ciascun nodo i nel layer t è rappresentato da una tupla:

$$\sigma_i^{(t)} = \left(\vec{r}_i, z_i, \vec{h}_i^{(t)} \right)$$

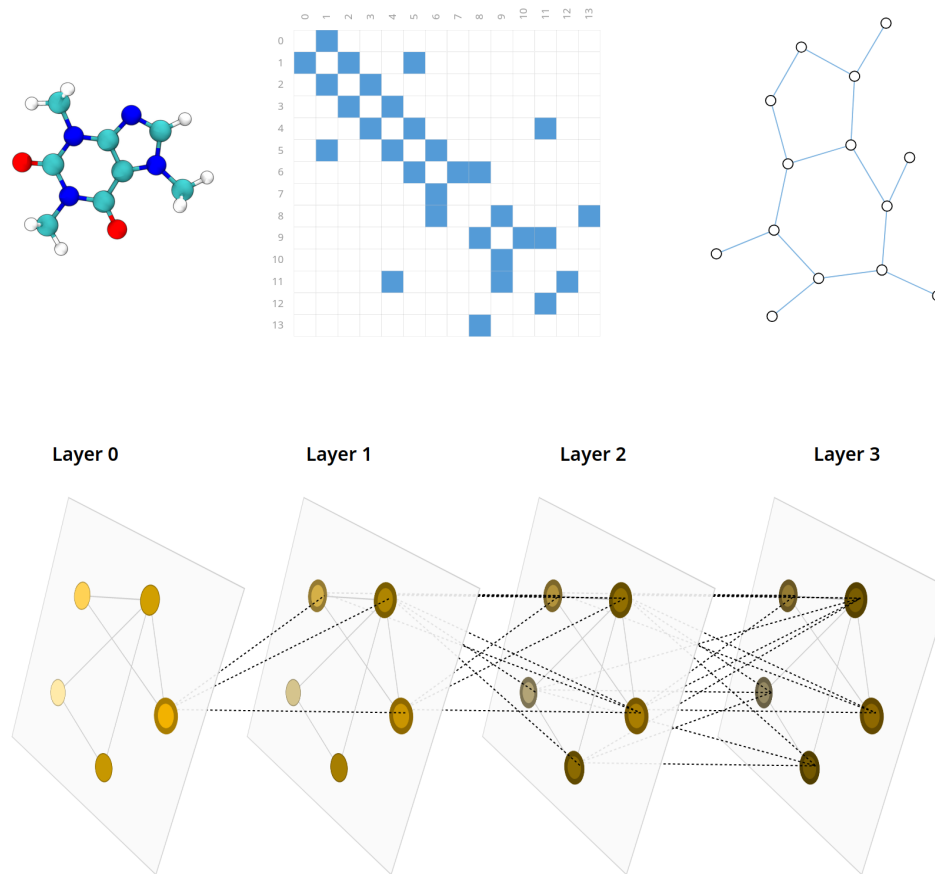


Reti neurali a grafo

- Ciascun nodo rappresenta un atomo
- Gli archi connettono i nodi se i corrispondenti atomi sono entro una data distanza tra loro
- Lo stato di ciascun nodo i nel layer t è rappresentato da una tupla:

$$\sigma_i^{(t)} = \left(\vec{r}_i, z_i, \vec{h}_i^{(t)} \right)$$

Posizione dell'atomo i



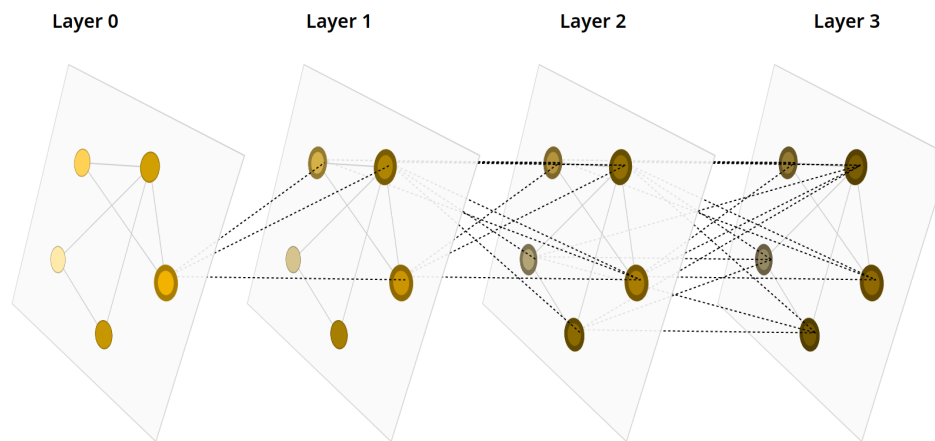
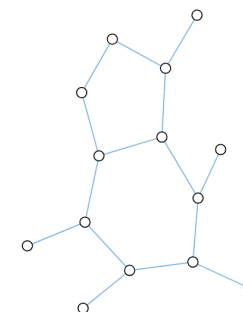
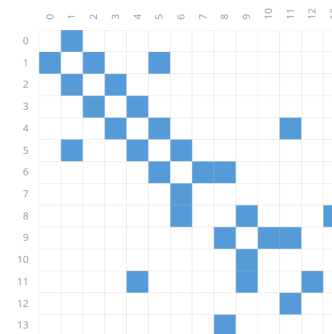
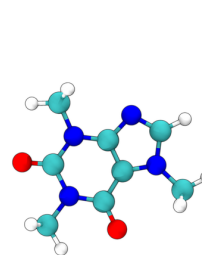
Reti neurali a grafo

- Ciascun nodo rappresenta un atomo
- Gli archi connettono i nodi se i corrispondenti atomi sono entro una data distanza tra loro
- Lo stato di ciascun nodo i nel layer t è rappresentato da una tupla:

$$\sigma_i^{(t)} = \left(\vec{r}_i, z_i, \vec{h}_i^{(t)} \right)$$

Posizione dell'atomo i

Specie chimica



Reti neurali a grafo

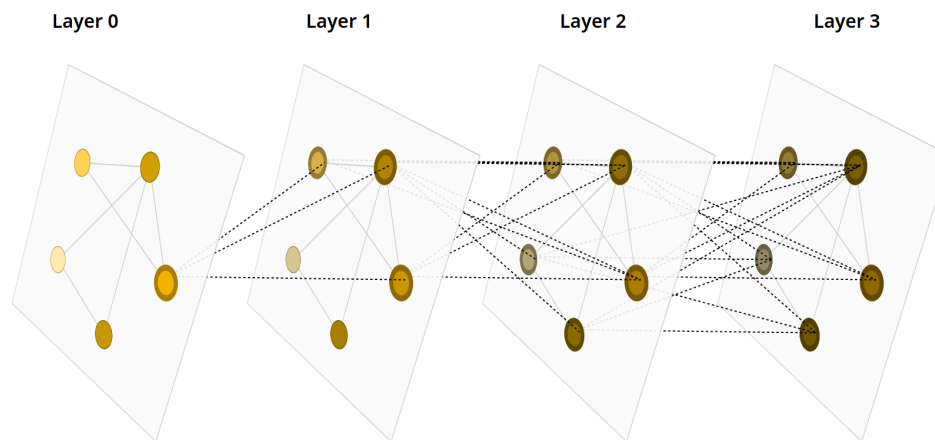
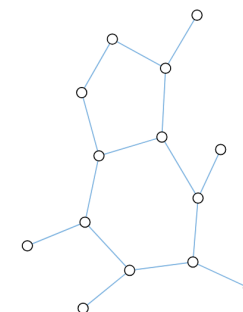
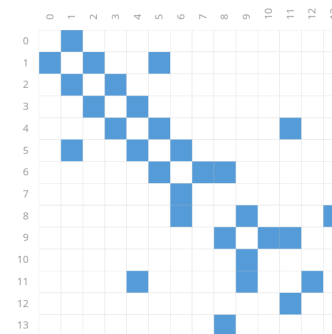
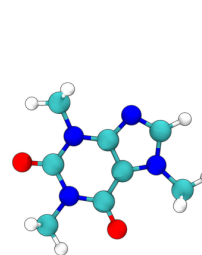
- Ciascun nodo rappresenta un atomo
- Gli archi connettono i nodi se i corrispondenti atomi sono entro una data distanza tra loro
- Lo stato di ciascun nodo i nel layer t è rappresentato da una tupla:

Caratteristiche apprendibili

$$\sigma_i^{(t)} = \left(\vec{r}_i, z_i, \vec{h}_i^{(t)} \right)$$

Posizione dell'atomo i

Specie chimica



Reti neurali a grafo

- Un passaggio tra layer consiste nella *costruzione, aggiornamento e lettura di messaggi*
- Nella fase di aggiornamento, il messaggio $\vec{m}_i^{(t)}$ è trasformato in nuove caratteristiche
- L'output finale è il contributo di energia di ciascun atomo all'energia potenziale

$$\vec{m}_i^{(t)} = \bigoplus_{j \in \mathcal{N}(i)} M_t \left(\sigma_i^{(t)}, \sigma_j^{(t)} \right)$$

$$\vec{h}_i^{(t+1)} = U_t \left(\sigma_i^{(t)}, \vec{m}_i^{(t)} \right)$$

$$E_i = \sum_{t=1}^T \mathcal{R}_t \left(\sigma_i^{(t)} \right)$$

Tutti gli operatori sono apprendibili ($M_t, \bigoplus_{j \in \mathcal{N}(i)}, U_t, \mathcal{R}_t$)

Proprietà di MACE

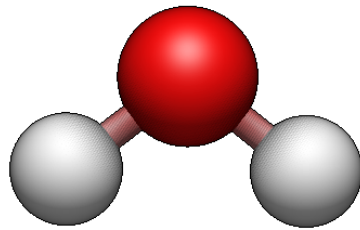
- È equivariante: le caratteristiche interne $\vec{h}_i^{(t)}$ si trasformano in modo preciso sotto l'azione di un gruppo, e.g. $O(3)$: **Matrice D di Wigner**

$$\vec{h}_i^{(t)}(Q \cdot (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)) = D(Q) \vec{h}_i^{(t)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

- È message-passing, e costruisce messaggi secondo uno schema originale:

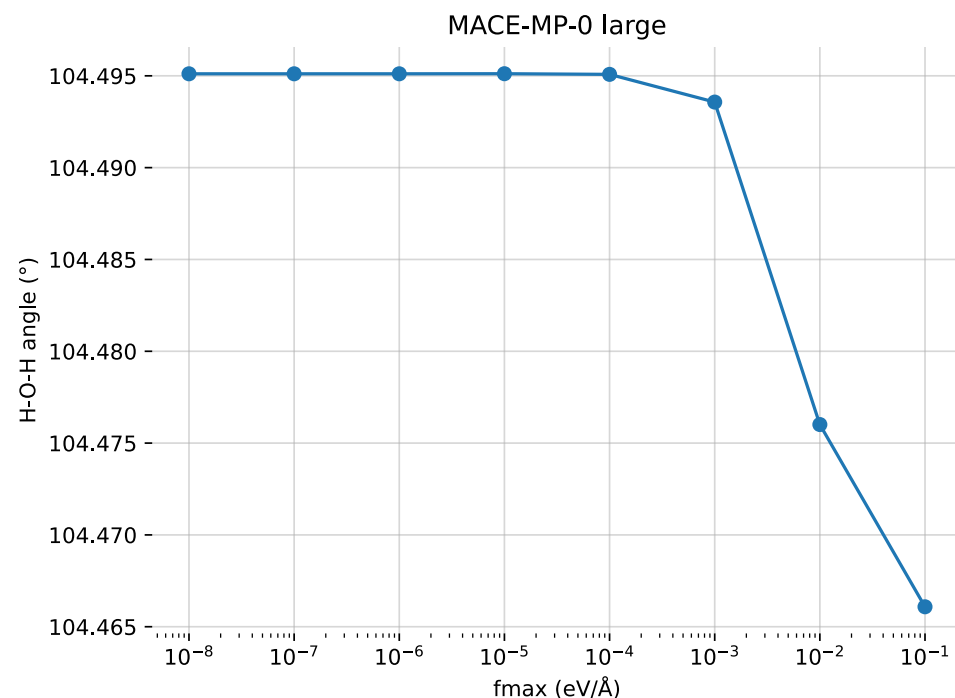
$$\begin{aligned} \vec{m}_i^{(t)} = & \sum_j \vec{u}_1 \left(\sigma_i^{(t)}; \sigma_j^{(t)} \right) \\ & + \sum_{j_1, j_2} \vec{u}_2 \left(\sigma_i^{(t)}; \sigma_{j_1}^{(t)}; \sigma_{j_2}^{(t)} \right) + \dots + \sum_{j_1, \dots, j_\nu} \vec{u}_\nu \left(\sigma_i^{(t)}; \sigma_{j_1}^{(t)}; \dots; \sigma_{j_\nu}^{(t)} \right) \end{aligned}$$

Monomero



Ottimizzazione della geometria

Monomero



Si sono ottimizzati la distanza del legame OH e l'angolo formato dalla molecola HOH, ottenendo valori coerenti con la letteratura, entro $0.01\text{\AA}$ e 0.5° , rispettivamente.

Si osserva ad esempio la soglia di convergenza nelle forze residue per il monomero, $f_{\max} = 10^{-4} \text{ eV/\AA}$.

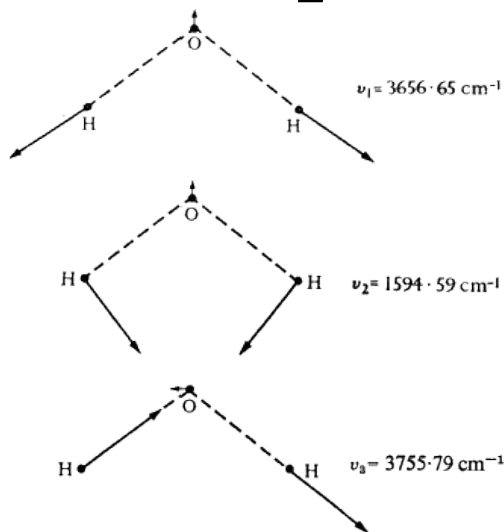
Frequenze di vibrazione (an)armoniche



$$G(v_1, v_2, v_3) = \sum_{i=1}^3 \omega_i \left(v_i + \frac{1}{2} \right) + \sum_{i=1}^3 \sum_{k \geq i}^3 x_{ik} \left(v_i + \frac{1}{2} \right) \left(v_k + \frac{1}{2} \right)$$

$$\text{ZPE} := G(0, 0, 0)$$

$$= \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) + \frac{1}{4}(x_{11} + x_{22} + x_{33} + x_{12} + x_{13} + x_{23})$$



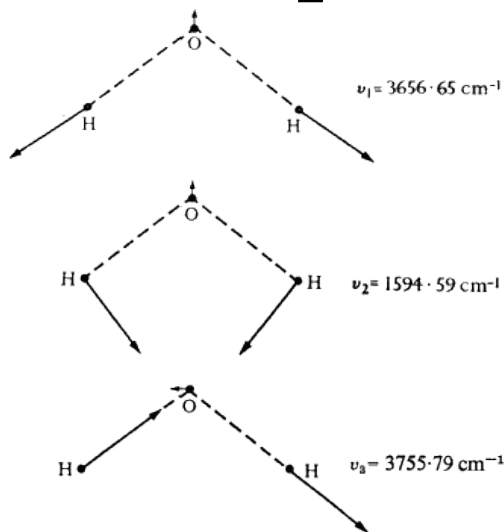
Frequenze di vibrazione (an)armoniche



$$G(v_1, v_2, v_3) = \sum_{i=1}^3 \omega_i \left(v_i + \frac{1}{2} \right) + \sum_{i=1}^3 \sum_{k \geq i}^3 x_{ik} \left(v_i + \frac{1}{2} \right) \left(v_k + \frac{1}{2} \right)$$

$$\text{ZPE} := G(0, 0, 0)$$

$$= \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) + \frac{1}{4}(x_{11} + x_{22} + x_{33} + x_{12} + x_{13} + x_{23})$$



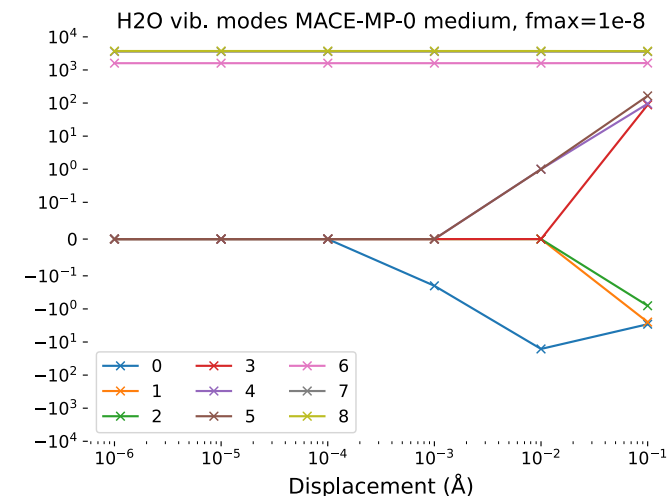
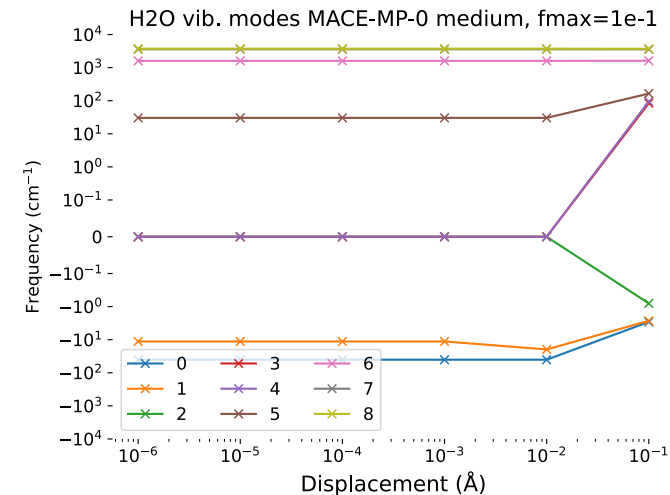
I contributi anarmonici **non** sono trascurabili per lo studio delle proprietà dell'acqua cristallina.



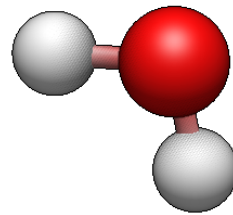
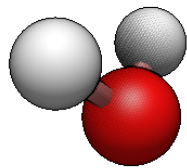
Frequenze di vibrazione armoniche

Modello	ω_1	ω_2	ω_3	ZPE (eV)
Reference	3832.17	1648.47	3942.53	0.585
small	3722.10	1485.10	3841.80	0.561
medium	3592.20	1601.10	3736.50	0.554
large	3695.60	1497.30	3814.80	0.558
ICE13-1	3702.30	1607.80	3807.50	0.565

Si sono poi calcolate le frequenze di vibrazione armoniche per verificare il loro accordo con i dati tabulati in referencia. Le frequenze sull'asse y negativo indicano instabilità della geometria. Il *Displacement* è lo spostamento degli atomi usato dalla tecnica di stima delle frequenze.

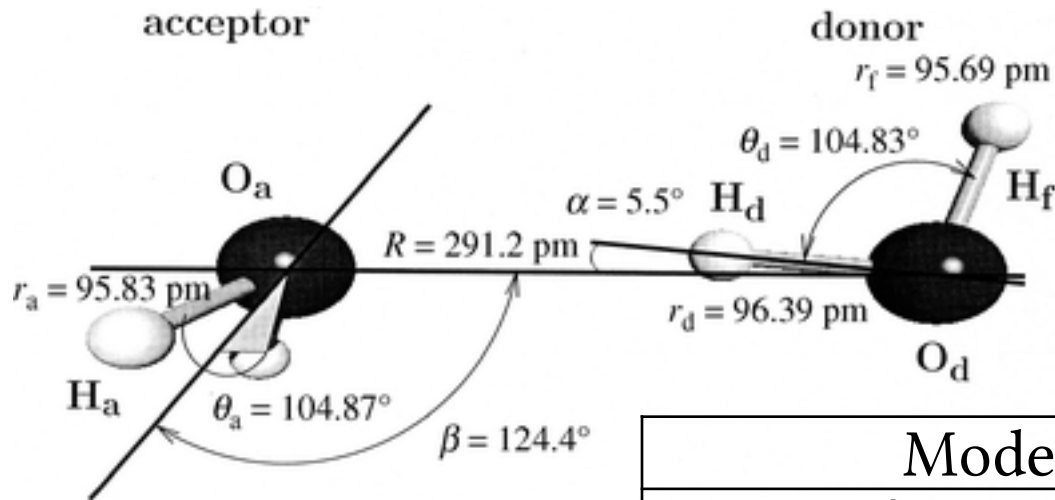


Dimero



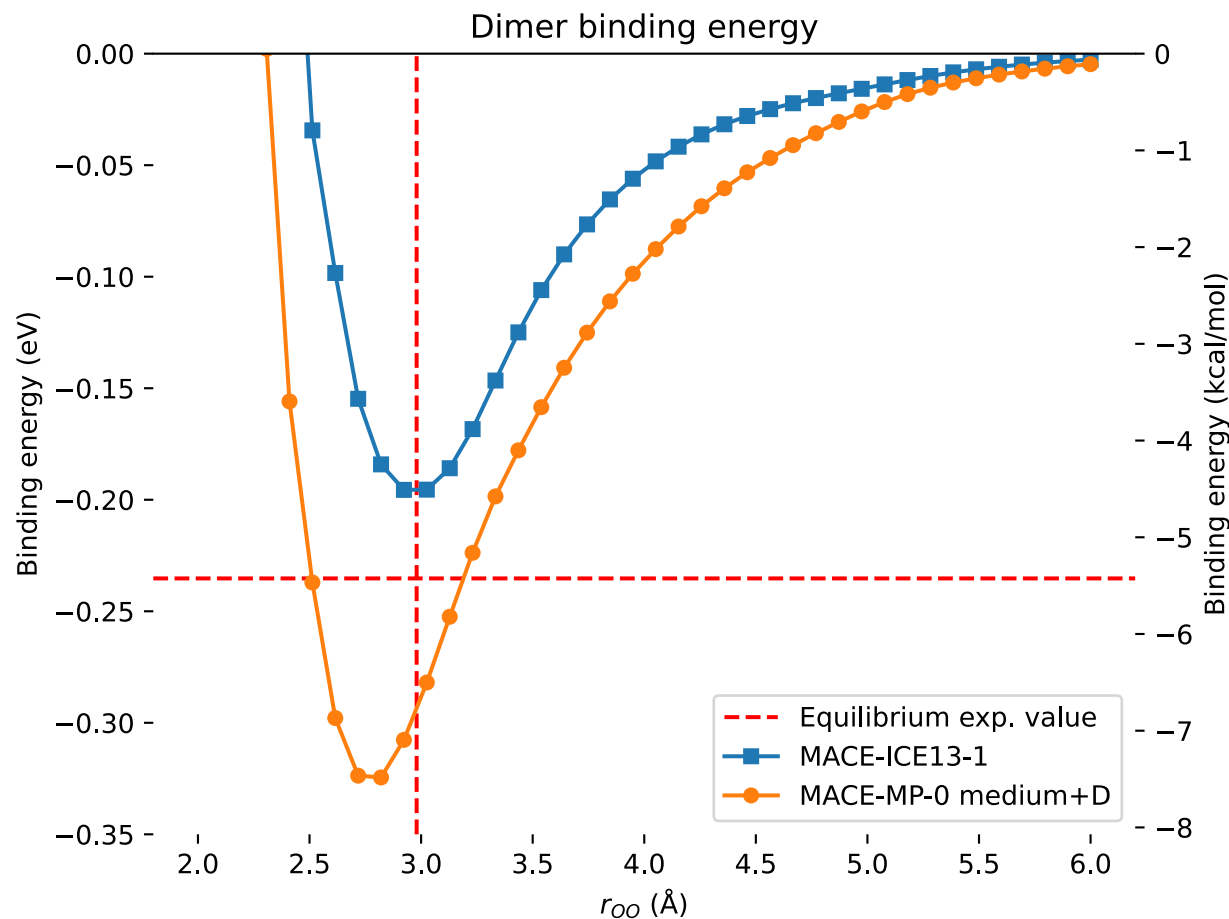
Ottimizzazione della geometria

Si è ripetuta la stessa procedura di ottimizzazione della geometria e studio delle frequenze di vibrazione armoniche e ZPE per il dimero.



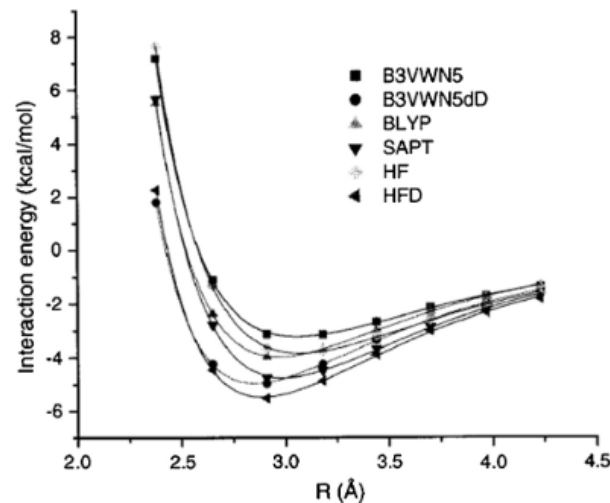
Model	α	θ_a	θ_d	$r_{OO}(\text{\AA})$	β
Reference	5.5	104.87	104.83	2.912	124.4
small	2.4	106.53	106.07	2.72	120.4
medium	6.7	104.05	105.43	2.77	99.4
large	1.6	105.29	105.23	2.82	118.0
MACE-ICE13-1	7.1	104.33	104.25	2.97	103.8

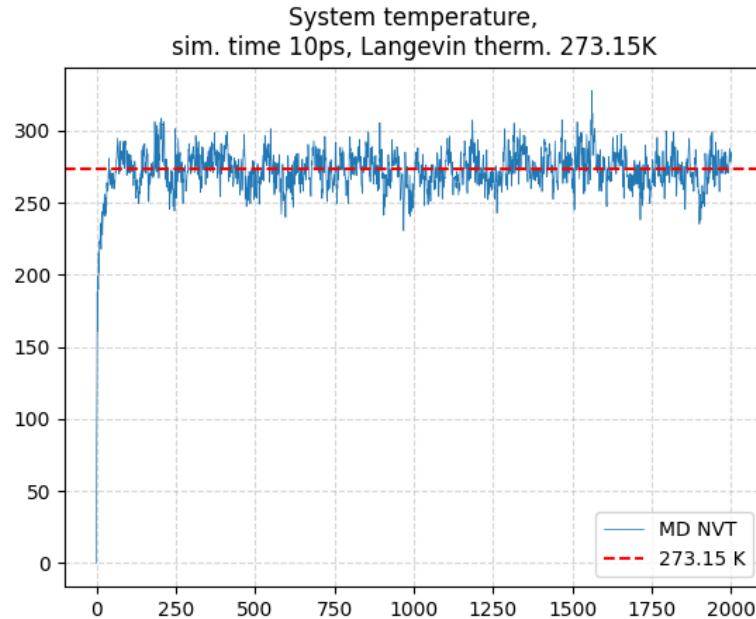
Binding energy in DFT



La binding energy si calcola come:

$$\Delta E_2 := E_2 - 2E_1$$





La dinamica molecolare è un metodo che permette di campionare lo spazio delle fasi di un sistema isolato di N particelle classiche interagenti, che obbediscono alle equazioni del moto di Newton:

$$\vec{f}_i = M\ddot{\vec{r}}_i = -\frac{\partial U(\{\vec{r}\})}{\partial \vec{r}_i}$$

Algoritmo di Verlet:

$$\vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\delta t + \frac{1}{2M}\vec{f}_i(t)(\delta t)^2 + \mathcal{O}((\delta t)^4)$$

Atomic Simulation Environment (ASE)

L'Atomic Simulation Environment (ASE) è un insieme di strumenti e moduli Python per impostare, manipolare, eseguire, visualizzare e analizzare simulazioni atomistiche. Il codice è liberamente disponibile sotto licenza GNU LGPL.

Atomic Simulation Environment (ASE)

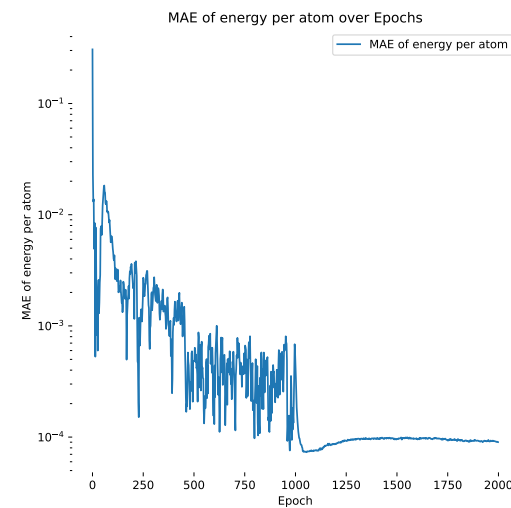
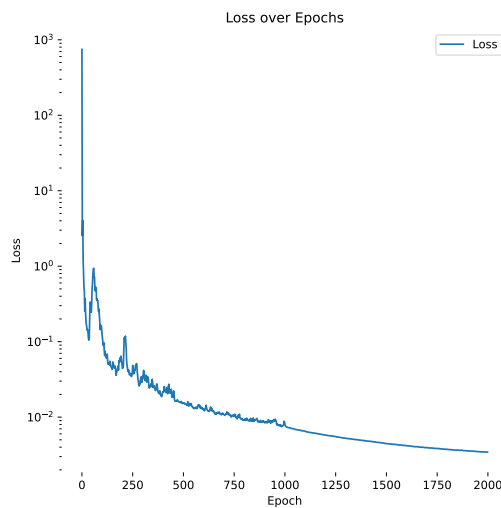
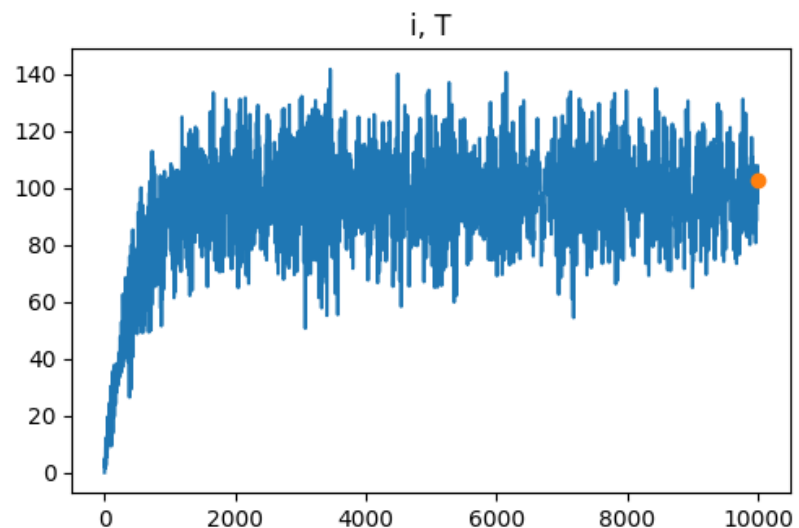
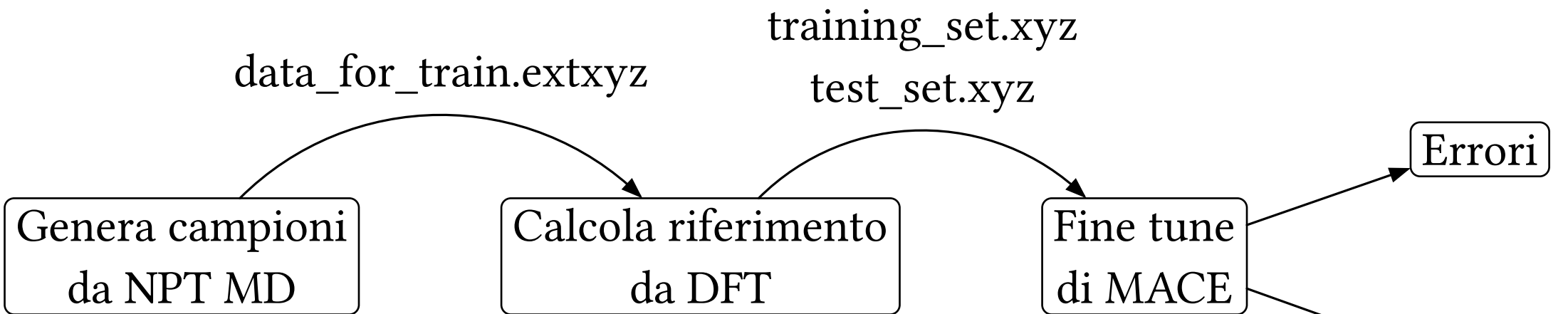
ASE fornisce interfacce a diversi codici attraverso i Calculator, che vengono utilizzati insieme all'oggetto centrale Atoms e ai numerosi algoritmi disponibili in ASE.



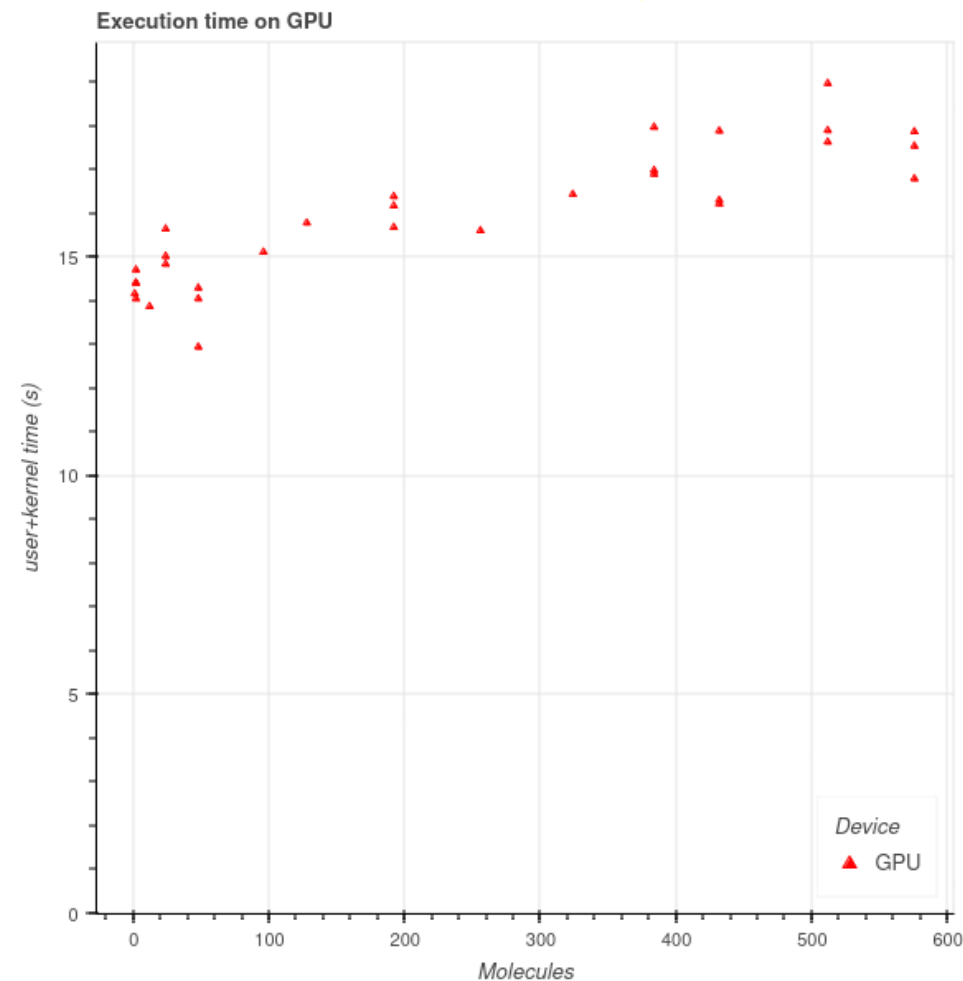
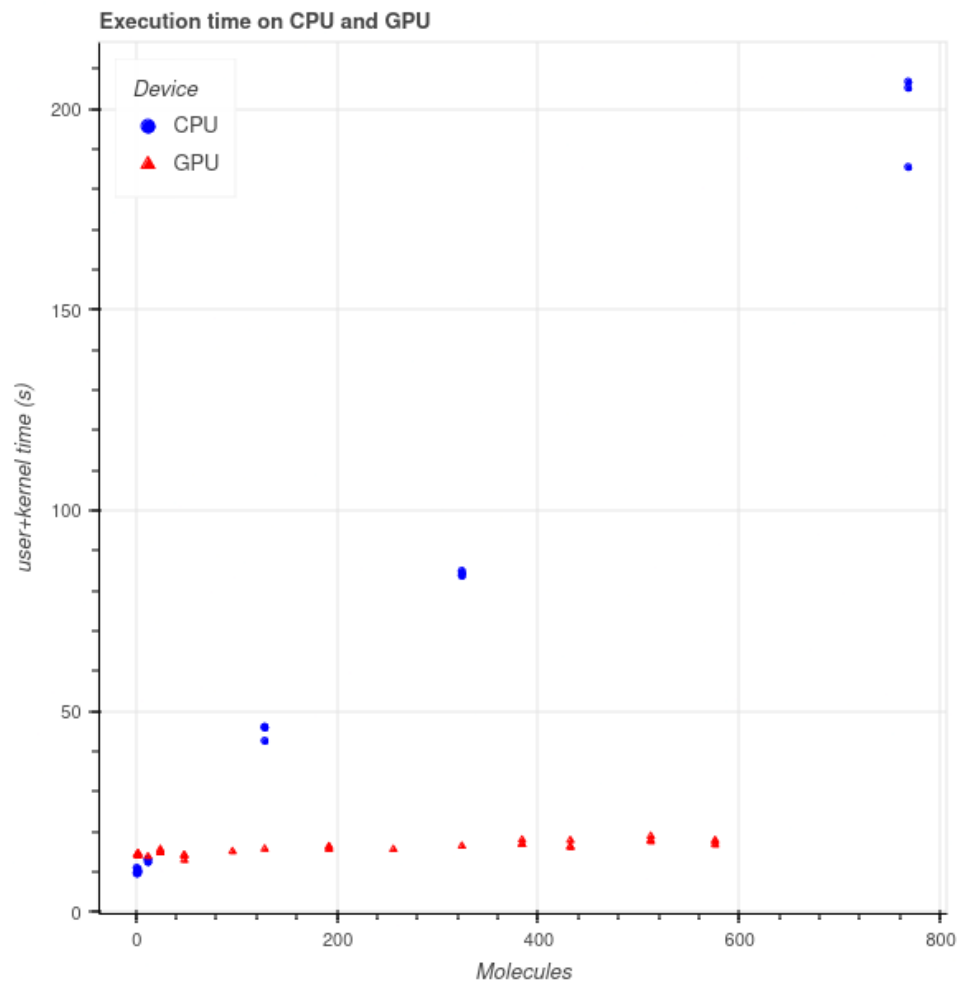
```
# Example: structure optimization of water molecule
from ase import Atoms
from ase.optimize import BFGS
from mace.calculators import mace_mp
from ase.io import write
h2o = Atoms("HOH", positions=[(0, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)])
h2o.calc = mace_mp(model="medium", dispersion=False, device="cuda")

opt = BFGS(h2o, trajectory="optimization.traj")
opt.run(fmax=0.02, steps=1000)
# BFGS:    0   19:10:49   -31.435229    2.2691
# BFGS:    1   19:10:50   -31.490773    0.3740
# BFGS:    2   19:10:50   -31.492791    0.0630
# BFGS:    3   19:10:51   -31.492848    0.0023
write('H2O.xyz', h2o)
h2o.get_potential_energy()
# -31.492847800329216
```

Fine tuning di MACE



Andamenti di tempi e memoria



Andamenti di tempi e memoria

