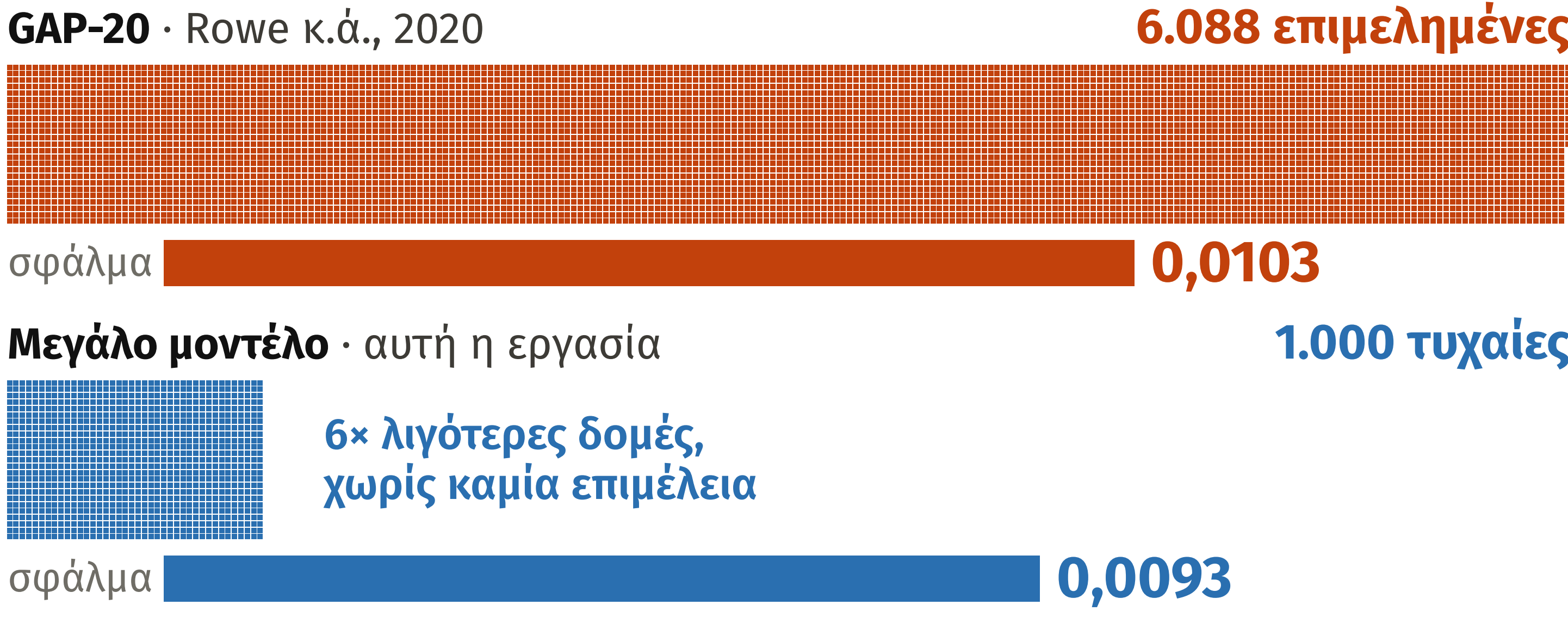


Δυναμικό GAP για τον άνθρακα από τυχαία επιλεγμένες, μη επιμελημένες δομές: σύγκριση με το GAP-20

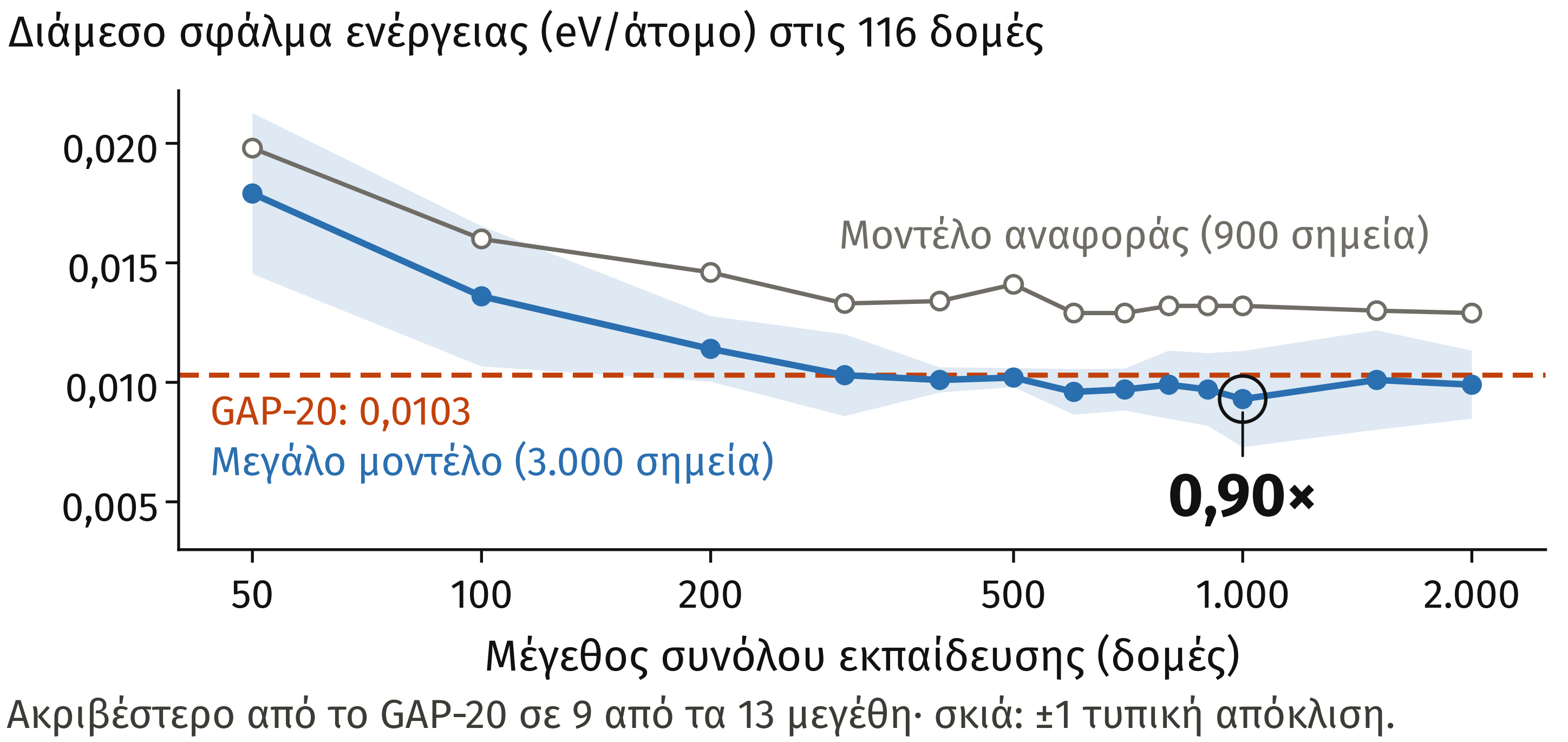
Χ. Δ. Χαλκίδης¹, Γ. Φανουργάκης¹
¹Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ · chalchri@chem.auth.gr
Θεματική 5 · Υπολογιστική Χημεία και Τεχνητή Νοημοσύνη

Κωδικός poster:

Τι ακρίβεια πετυχαίνει ένα δυναμικό μηχανικής μάθησης όταν οι δομές εκπαίδευσης αντλούνται τυχαία;
Με 1.000 τυχαίες, μη επιμελημένες δομές, ένα δυναμικό GAP φτάνει την ακρίβεια του GAP-20, που εκπαιδεύτηκε σε 6.088 επιμελημένες.



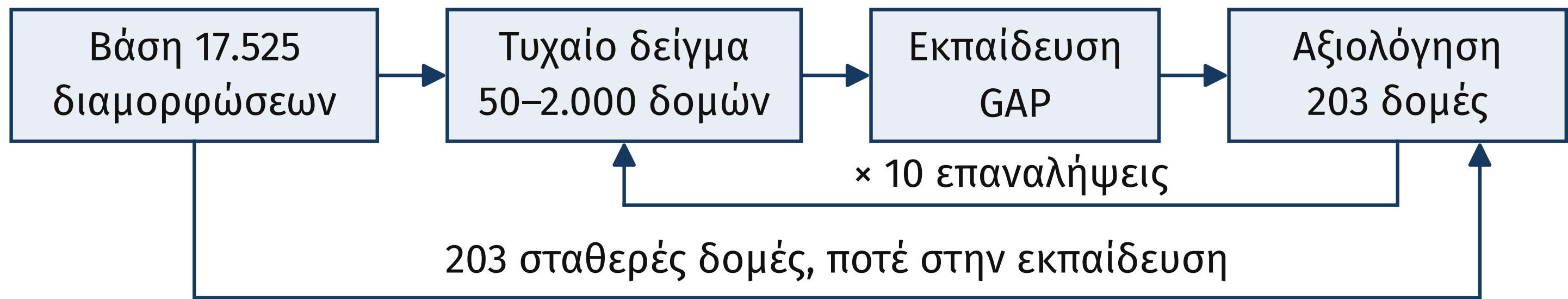
Κάθε τετράγωνο: μία δομή εκπαίδευσης. Σφάλμα: διάμεσο (eV/άτομο) στις **116 δομές** που κανένα από τα δύο μοντέλα δεν είδε· λόγος 0,90.



1 1.040 δυναμικά σε τυχαία δείγματα 50–2.000 δομών

Τα δυναμικά μηχανικής μάθησης (εδώ GAP με περιγραφέα SOAP) δίνουν ενέργειες DFT με κόστος μικρότερο κατά τάξεις μεγέθους την ακρίβειά τους την ορίζουν οι δομές εκπαίδευσης.

8 ρυθμίσεις × 13 μεγέθη × 10 επαναλήψεις = 1.040

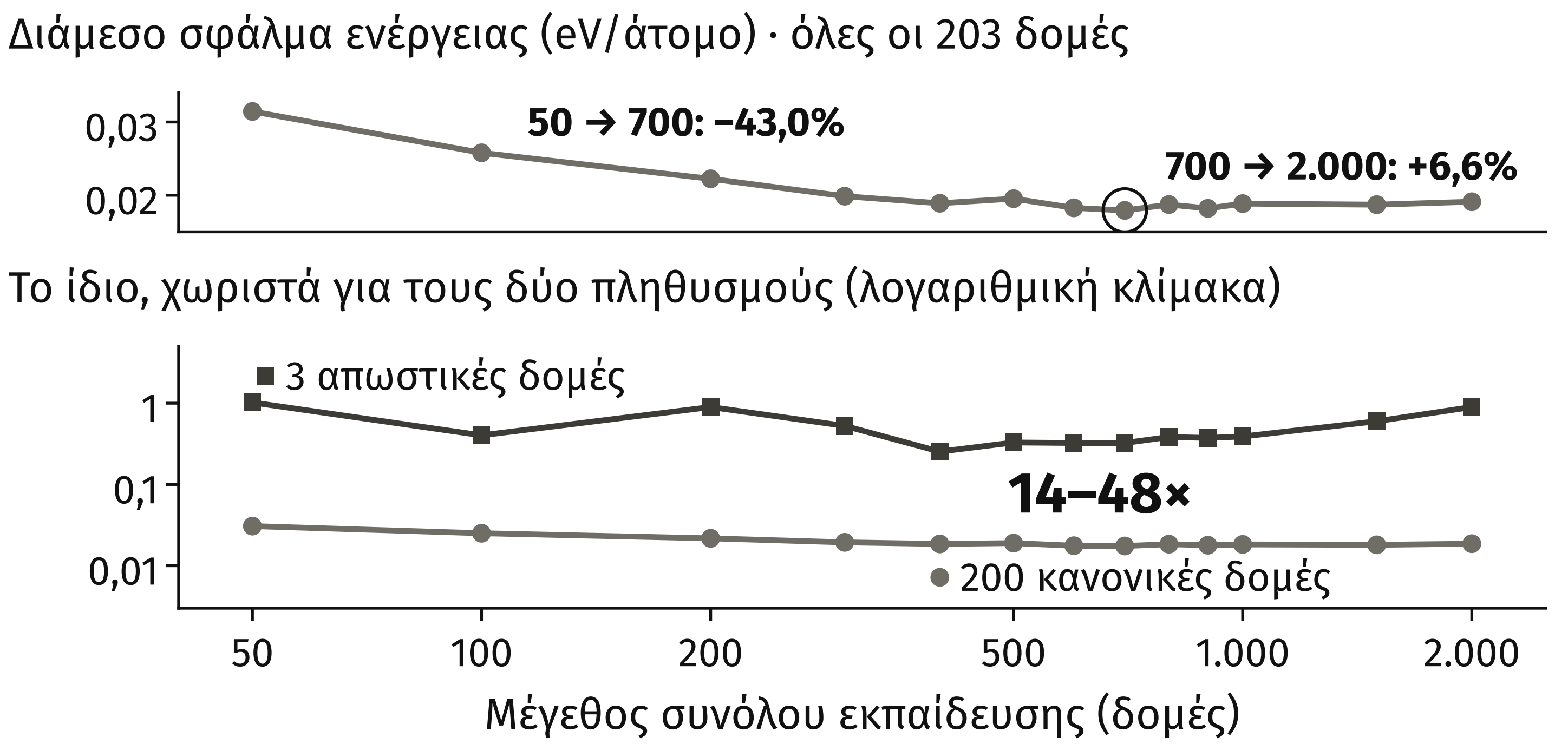


Κάθε ρύθμιση αλλάζει μία παράμετρο, π.χ. τη «χωρητικότητα»: 300–3.000 αντιπροσωπευτικά σημεία. ~316 h στον «Αριστοτέλη» του ΑΠΘ (≈ 10.100 ώρες CPU).

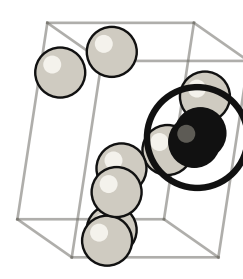


Σκανάρετε: το poster σε ελληνικά και αγγλικά, η περίληψη και οι αναφορές.
9psxmpf.chalkidis.eu

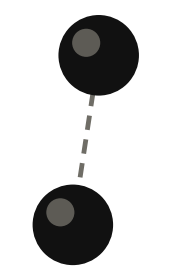
2 Η καμπύλη κρύβει 3 απωστικές δομές, 14–48× χειρότερες



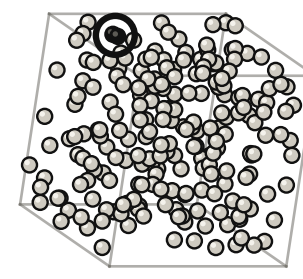
Η άνοδος δεν είναι υπερπροσαρμογή (το χάσμα εκπαίδευσης–αξιολόγησης κλείνει, 7,6× → 1,1×): τη φέρνουν λίγες ακραίες δομές, που δεν προβλέπονται και χαλούν την προσαρμογή όταν μπουκ στην εκπαίδευση.



Κρυσταλλική
10 άτομα
–0,96 eV/άτομο



Διμερές
2 άτομα · 2,83 Å
+0,06 eV/άτομο



Υγρό
216 άτομα
+4,05 eV/άτομο

Απωστική: ενέργεια DFT πάνω από –4 eV/άτομο· οι κανονικές έχουν διάμεσο –7,20.

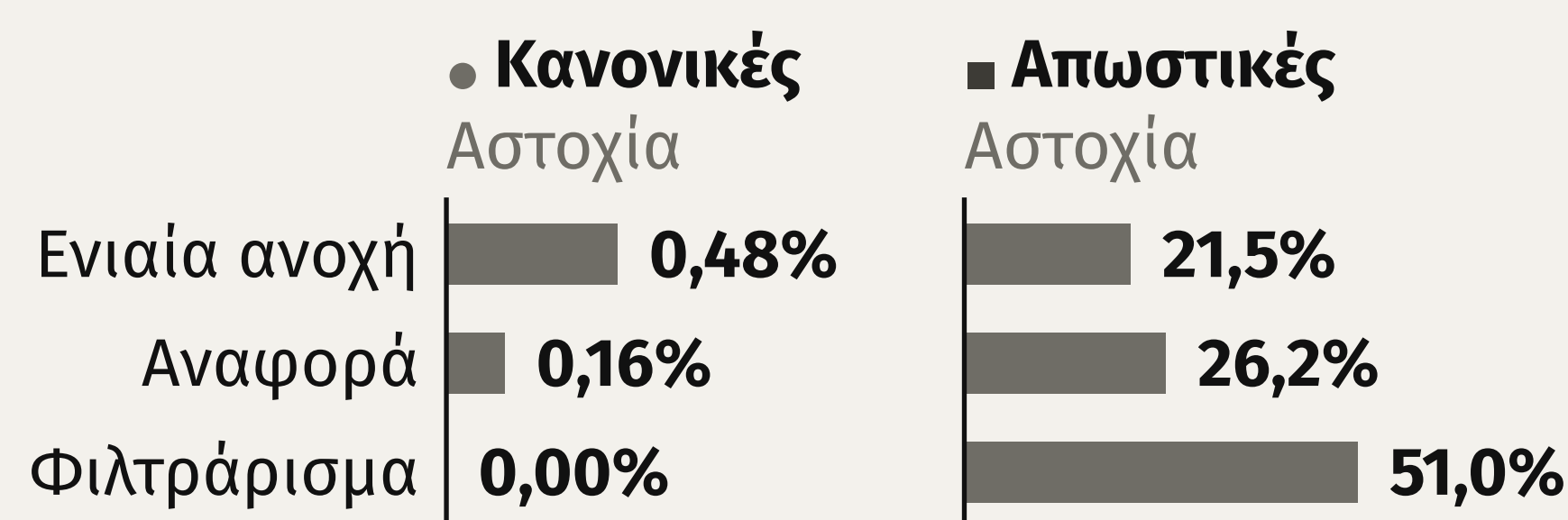
3 Τρεις ανεξάρτητες ενδείξεις: το όριο είναι στα δεδομένα

α Μεγαλύτερο μοντέλο: καλύτερο στις κανονικές, όχι στις απωστικές



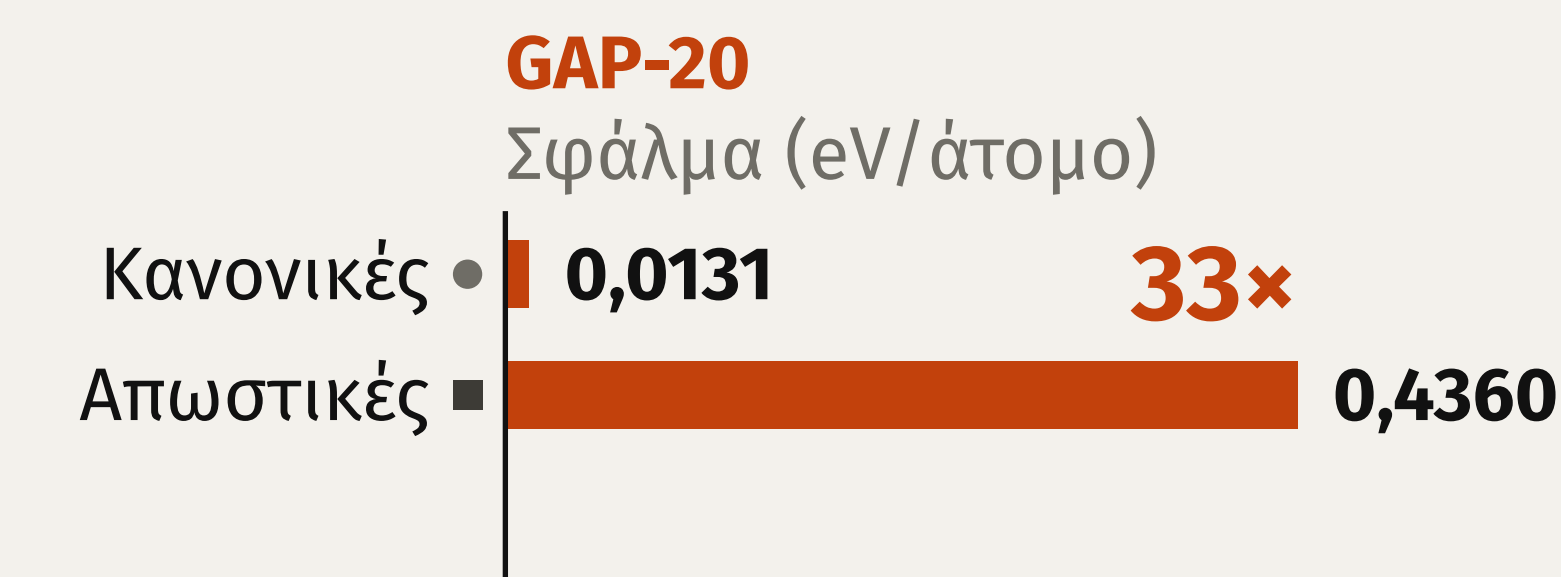
Συνολικά –40,5% για 10× σημεία. Το σφάλμα του είχε προβλεφθεί πριν από την εκπαίδευση (0,0146–0,0166 eV/άτομο)· μετρήθηκε 0,0152.

β Άλλη εκπαίδευση: ό,τι κερδίζουν οι κανονικές το χάνουν οι απωστικές



Αστοχία: σφάλμα > 1 eV/άτομο. Ενιαία ανοχή για όλες τις δομές· φιλτράρισμα: χωρίς δομές με δύναμη > 50 eV/Å.

γ Το GAP-20 αποτυγχάνει στις ίδιες δομές



Ίδια τάξη μεγέθους με το δικό μας 14–48×, παρά την επιμέλεια και τα 9.000 σημεία του.

Σε μη επιμελημένη βάση, την ακρίβεια την περιορίζουν τα δεδομένα, όχι το μοντέλο.

Η επιμέλεια δεν είναι προαπαιτούμενο, αλλά ένας από τους μοχλούς.

Επόμενο βήμα: περισσότερες απωστικές δομές στην εκπαίδευση, με ενεργή μάθηση από τη διαφωνία μιας επιτροπής μοντέλων.

Περιορισμοί: μόνο 3 απωστικές δομές αξιολόγησης· η αξιολόγηση προέρχεται από την ίδια βάση με τα δείγματά μας, άρα το 0,90 είναι ένδειξη ισοδυναμίας.

