

大规模原子系统的AI模拟

能源和环境
纳米技术与新材料

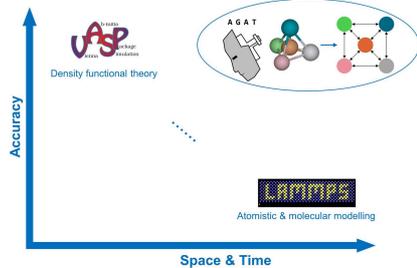


图 1. AGAT 在高精度材料性质模拟方面具有广阔的前景

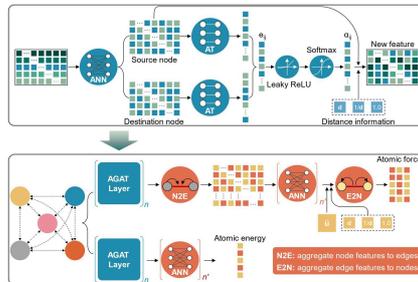


图 2. AGAT 是一个具有高灵活性和高效性的 Python 模块。

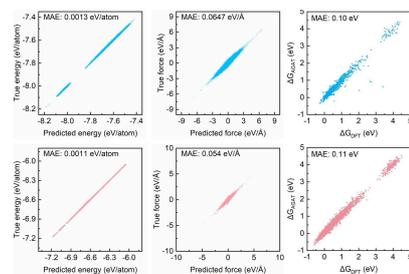


图 3. AGAT 在能量、原子受力和晶胞应力的预测方面表现出优于其他机器学习原子势的潜力。

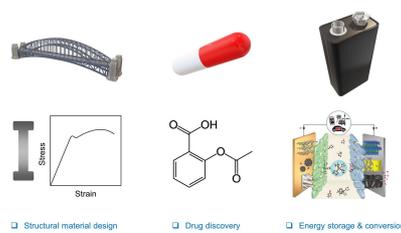


图 4. AGAT 在结构材料模拟、药物设计和新能源材料的发现表现出广阔前景

Remarks
第48届日内瓦国际发明展 (2023年) - 银奖

IP状态
专利已存档

技术成熟度等级 (TRL) ?

7

发明人
赵仕俊教授
张俊
询问: kto@cityu.edu.hk

前景

基于密度泛函理论 (DFT) 的从头算 (ab initio) 方法被广泛应用于模拟材料、蛋白质和药物的物理化学性质。然而，该类方法成本高昂，在模拟超过100个原子的体系时遇到困难。经典分子动力学在研究大规模原子体系的性质方面非常有效，然而，经典分子动力学所用的原子势往往通过拟合有限的实验或理论数据获得。因此，该类原子势在预测原子能量和受力方面的准确性相当有限。具备DFT精度的深度学习势可以大大提高原子模拟的效率，为寻找新材料和设计现有材料的新功能提供指导。

技术细节

本发明提出了一种基于注意力的原子图神经网络 (AGAT) 深度学习框架。AGAT模型能从DFT模拟中学习原子能量、受力和晶胞应力。训练后的模型能以接近DFT的精度模拟更多粒子和更长时间的原子/分子体系。相比传统的机器学习原子间势，AGAT模型提供了准确且有效的端到端解决方案，可用于大规模原子系统的能量、受力和晶胞应力的训练和预测。

优势

- AGAT具有很高的预测精度



- AGAT具有较强的扩展性
- AGAT提供了获取任何给定原子体系能量、原子受力和晶胞应力的端到端解决方案

应用场景

- 大规模分子模拟
- 高效的电催化剂设计
- 精确的机械性能预测
- 高效优化晶体结构模型
- 预测材料中的缺陷性质

