

Determinación del Sistema Cristalino con MobileNetV2

Juliana del Valle

Universidad de Antioquia

Vierenes 7 de Febrero 2025

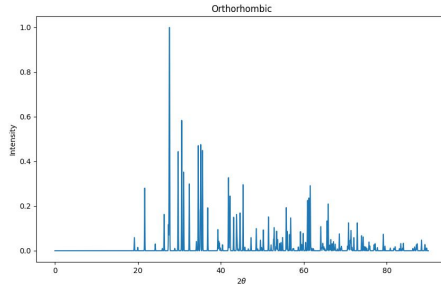
Introducción

- El estudio de la estructura cristalina de los sólidos es fundamental para su comprensión.
- La difracción de rayos-x permite determinar la estructura cristalina.

La estructura cristalina determina el grupo de simetrías del cristal.
Las propiedades físicas de los material exhiben las simetrías del cristal
(Principio de Neumann)

Introducción

- El estudio de la estructura cristalina de los sólidos es fundamental para su comprensión.
- La difracción de rayos-x permite determinar la estructura cristalina.



Introducción

- El indexado de patrones es una tarea compleja que requiere experiencia en cristalografía.
- Las redes neuronales Convolucionales (CNN) pueden utilizarse para determinar la estructura cristalina.
- Esta tarea sigue siendo complicada debido a que hay muchos grupos espaciales.
- Se espera que con "pocos" datos se pueda determinar por lo menos el sistema cristalino.

Introducción

- El indexado de patrones es una tarea compleja que requiere experiencia en cristalografía.
- Las redes neuronales Convolucionales (CNN) pueden utilizarse para determinar la estructura cristalina.
- Esta tarea sigue siendo complicada debido a que hay muchos grupos espaciales.
- Se espera que con "pocos" datos se pueda determinar por lo menos el sistema cristalino.

Introducción

- El indexado de patrones es una tarea compleja que requiere experiencia en cristalografía.
- Las redes neuronales Convolucionales (CNN) pueden utilizarse para determinar la estructura cristalina.
- Esta tarea sigue siendo complicada debido a que hay muchos grupos espaciales.
- Se espera que con "pocos" datos se pueda determinar por lo menos el sistema cristalino.

Introducción

- El indexado de patrones es una tarea compleja que requiere experiencia en cristalografía.
- Las redes neuronales Convolucionales (CNN) pueden utilizarse para determinar la estructura cristalina.
- Esta tarea sigue siendo complicada debido a que hay muchos grupos espaciales.
- Se espera que con "pocos" datos se pueda determinar por lo menos el sistema cristalino.

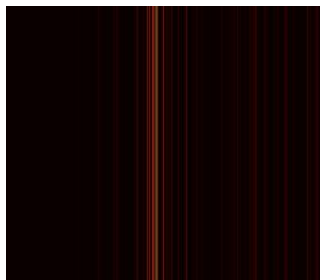
Metodología

- Obtención de datos (Ong et al., 2013) material ward2018matminer .
- Generación de los patrones.
- MobileNetV2-Capas de convolución separables. (Howard et al., 2017) (Sandler et al., 2019).



Metodología

- Obtención de datos (Ong et al., 2013) material ward2018matminer .
- Generación de los patrones.
- MobileNetV2-Capas de convolución separables. (Howard et al., 2017) (Sandler et al., 2019).

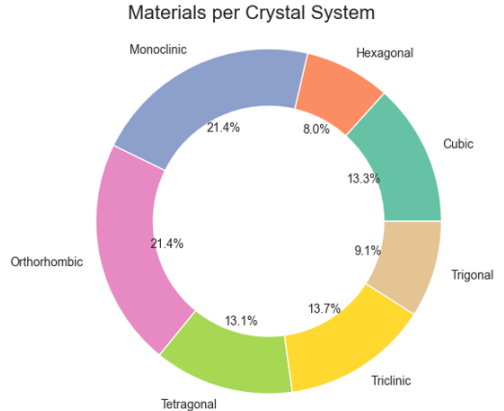
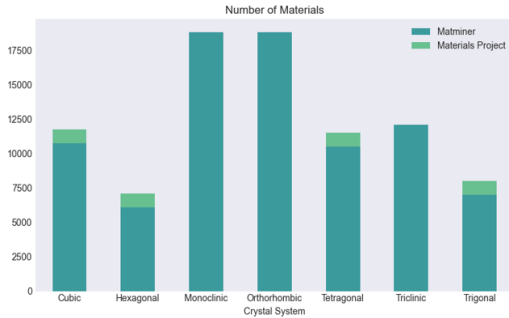


Metodología

- Obtención de datos (Ong et al., 2013) material ward2018matminer .
- Generación de los patrones.
- MobileNetV2-Capas de convolución separables. (Howard et al., 2017) (Sandler et al., 2019).

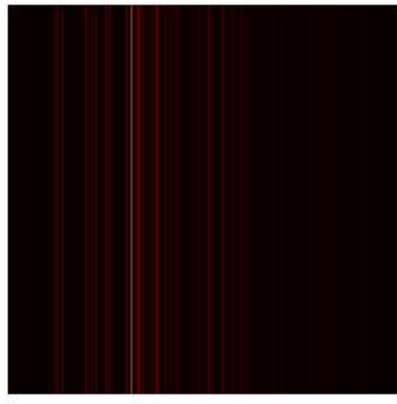
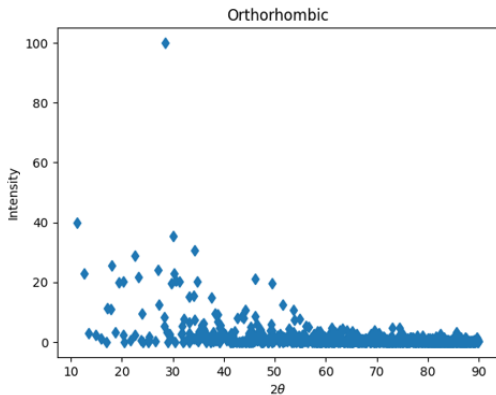
Resultados

● Obtención de datos.



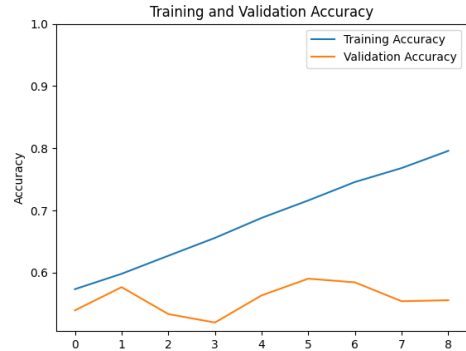
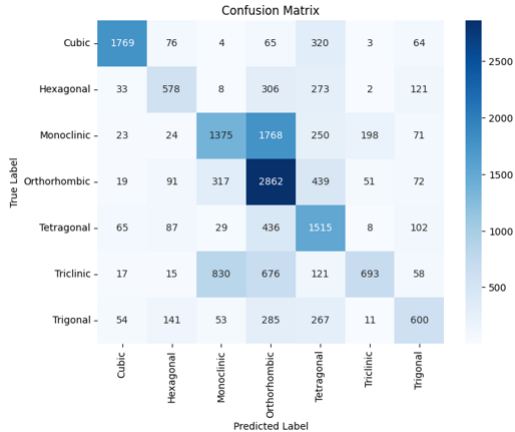
Resultados

- Generación de los patrones.



Resultados

● MobileNetV2.



Resultados

	Cubic	Hexagonal	Monoclinic	Orthorhombic	Tetragonal	Triclinic	Trigonal	Accuracy
Precision	0.89	0.57	0.53	0.45	0.48	0.72	0.55	0.54
Recall	0.77	0.44	0.37	0.74	0.68	0.29	0.43	0.54
F1-score	0.83	0.50	0.43	0.56	0.56	0.41	0.48	0.54

Conclusiones

- Es posible.

Park et al., lograron exactitudes del 94.99% en la determinación del sistema cristalino(Park et al., 2017).

Oviedo et al., lograron determianr del grupo espacial de peliculas delgadas con una exactitud del 89% (Oviedo et al., 2019).

Conclusiones

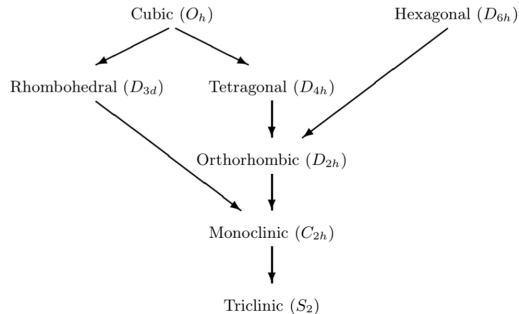
- Errores en la generación de patrones.
- Muy pocos datos.
- Dificultades teóricas (Sólyom, 2008).

Conclusiones

- Errores en la generación de patrones.
- Muy pocos datos.
- Dificultades teóricas (Sólyom, 2008).

Conclusiones

- Errores en la generación de patrones.
- Muy pocos datos.
- Dificultades teóricas (Sólyom, 2008).








Conclusiones

- El modelo.
- El Formato de los datos.

Conclusiones

- El modelo.
- El Formato de los datos.

-  Howard, Andrew G. et al. (2017). *MobileNets: Efficient Convolutional Neural Networks for Mobile Vision Applications*. arXiv: 1704.04861 [cs.CV]. URL: <https://arxiv.org/abs/1704.04861>.
-  Ong, Shyue Ping et al. (2013). “Python Materials Genomics (pymatgen): A Robust, Open-Source Python Library for Materials Analysis”. In: *Computational Materials Science* 68, pp. 314–319. DOI: [10.1016/j.commatsci.2012.10.028](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.10.028). URL: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.10.028>.
-  Oviedo, Felipe et al. (May 2019). “Fast and interpretable classification of small X-ray diffraction datasets using data augmentation and deep neural networks”. In: *npj Computational Materials* 5.1, p. 60. ISSN: 2057-3960. DOI: [10.1038/s41524-019-0196-x](https://doi.org/10.1038/s41524-019-0196-x). URL: <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0196-x>.

-  Park, Woon Bae et al. (July 2017). “Classification of crystal structure using a convolutional neural network”. eng. In: *IUCrJ* 4.Pt 4, pp. 486–494. ISSN: 2052-2525. DOI: 10.1107/S205225251700714X.
-  Sandler, Mark et al. (2019). *MobileNetV2: Inverted Residuals and Linear Bottlenecks*. arXiv: 1801.04381 [cs.CV]. URL: <https://arxiv.org/abs/1801.04381>.
-  Sólyom, Jenő (Nov. 2008). *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume II: Electronic Properties*. en. Springer Science & Business Media. ISBN: 978-3-540-85315-2.