

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ

ОТЧЕТ ПО НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
Решение проблемы фаз в кристаллографии
методами машинного обучения

Студент . . .

Группа . . .

Научный руководитель . . .

Москва 2020

Содержание

1	ВВЕДЕНИЕ	3
2	ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	3
3	ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ	3
4	РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ	5

1 ВВЕДЕНИЕ

Что, зачем, актуальность,

2 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

Текущие попытки применения ML моделей в химии/кристаллографии

3 ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Все модели обучались на суперкомпьютере НИУ ВШЭ «Харизма». Для создания моделей использовался язык python и библиотеки машинного обучения Tensorflow и Keras.

Обучение модели с одним скрытым слоем из 709 нейронов на 709 отражениях из 7000 файлов дало следующие результаты:

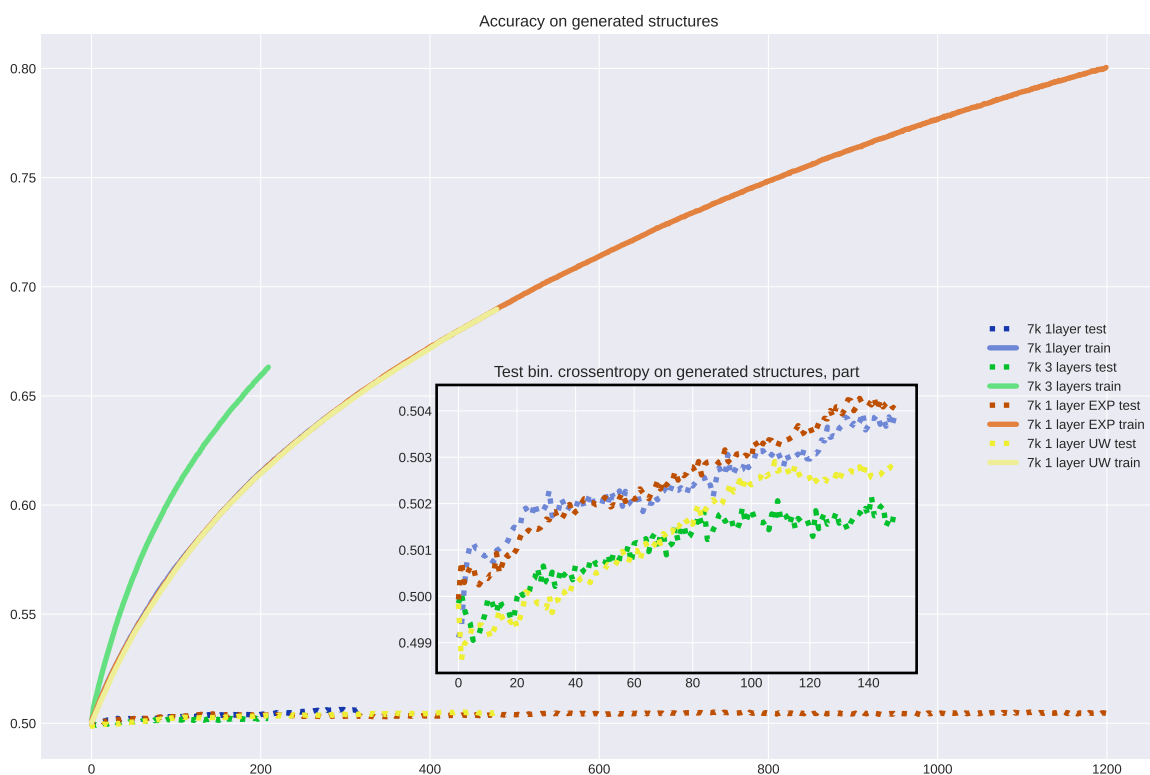


Рис. 1:

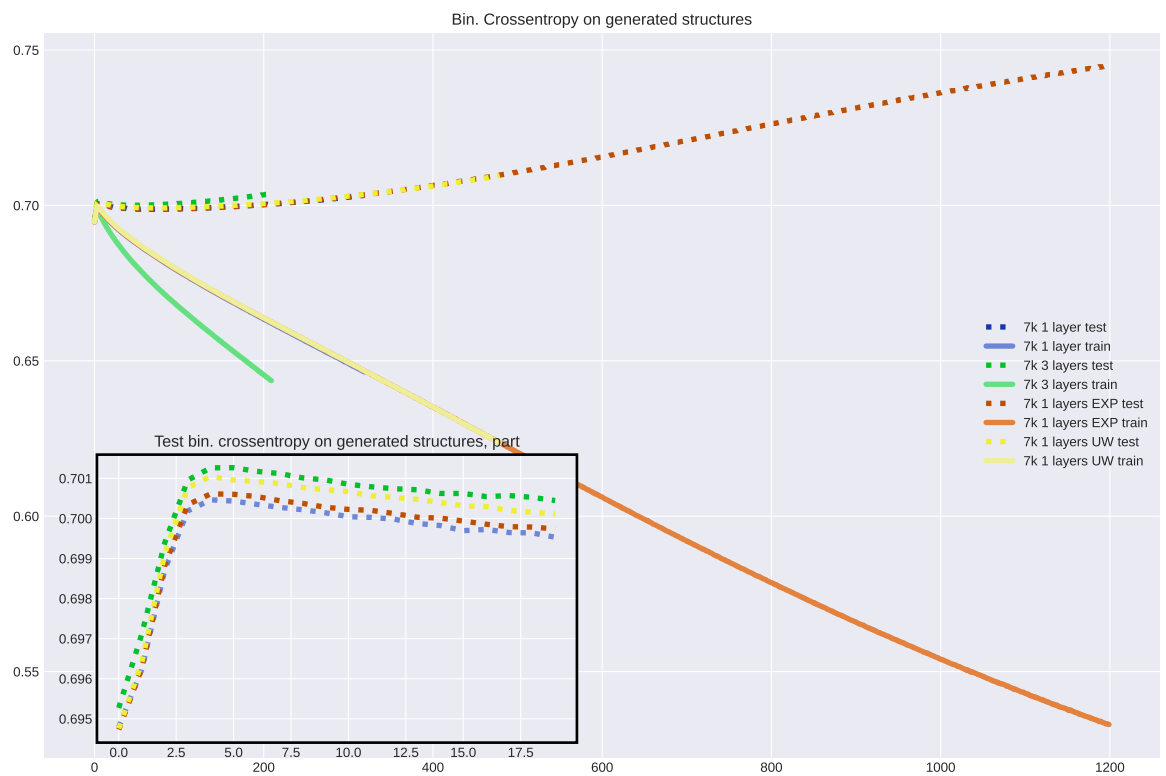


Рис. 2:

Обучение той же модели на 709 отражениях из 50 000 файлов дало следующие результаты:

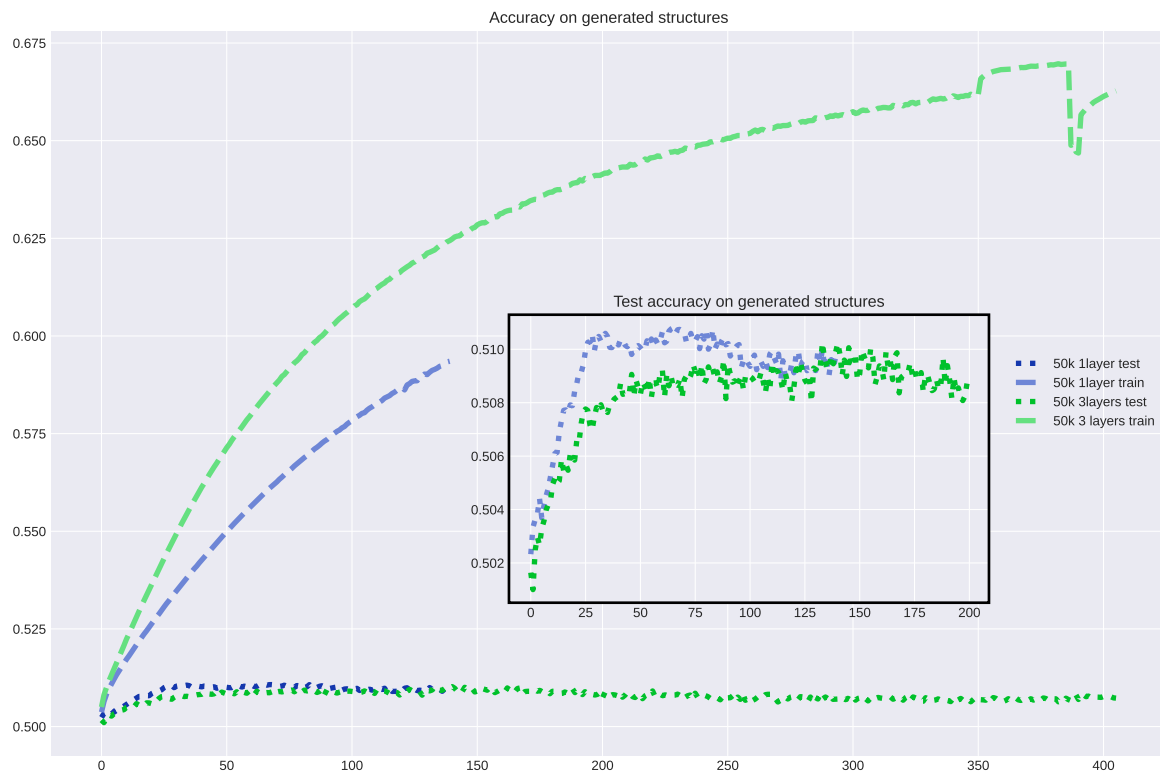


Рис. 3:

Зависимость качества обучения от размера датасета

То же для 3 слоев

Зависимость качества обучения от типа весов

4 РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

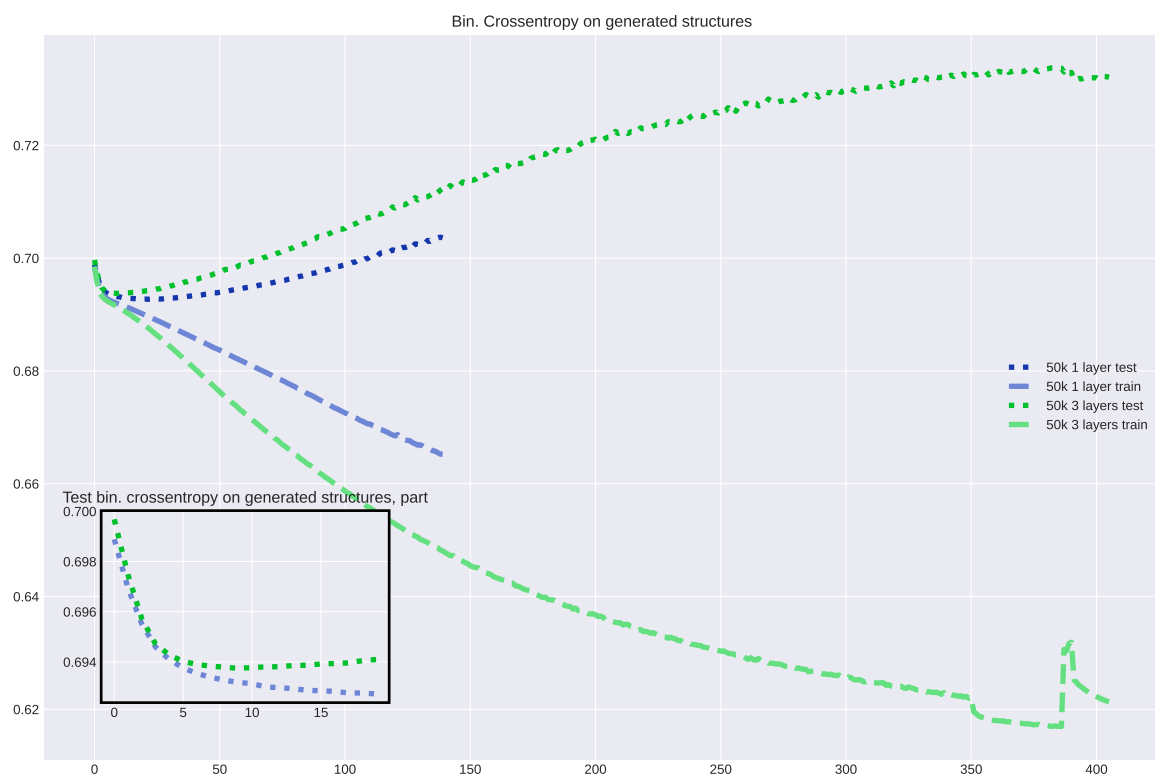


Рис. 4:

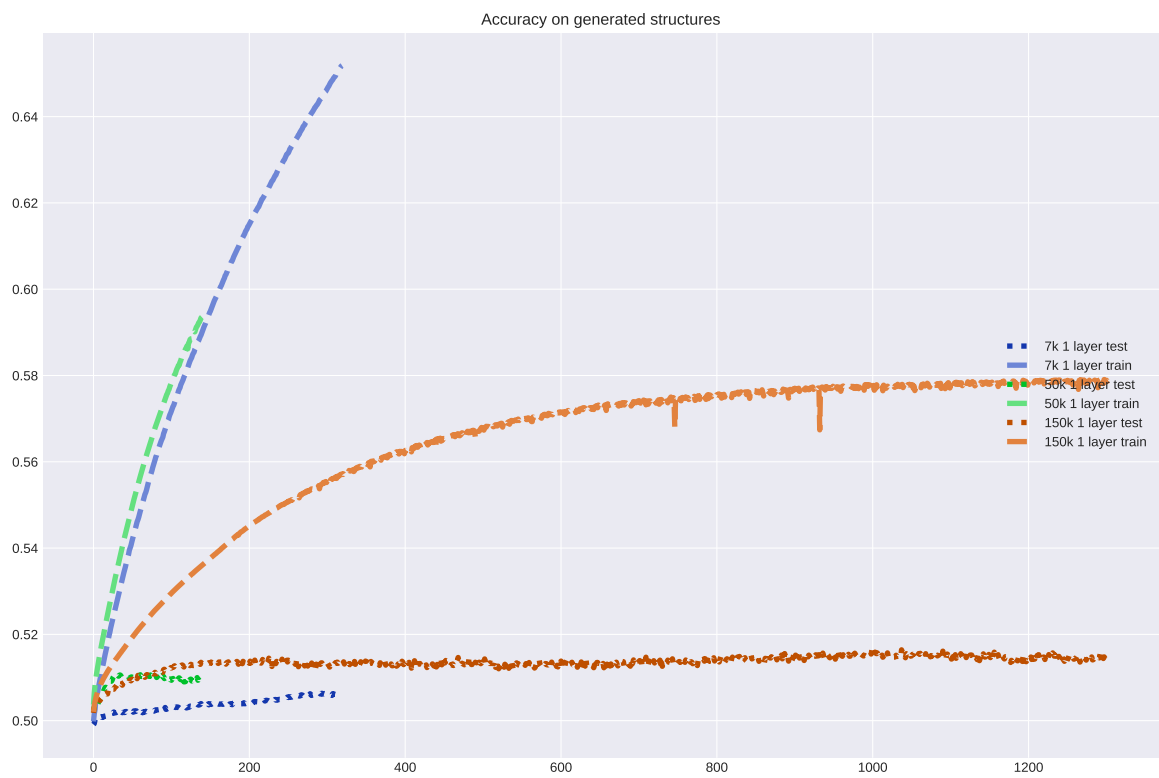


Рис. 5:



Рис. 6:

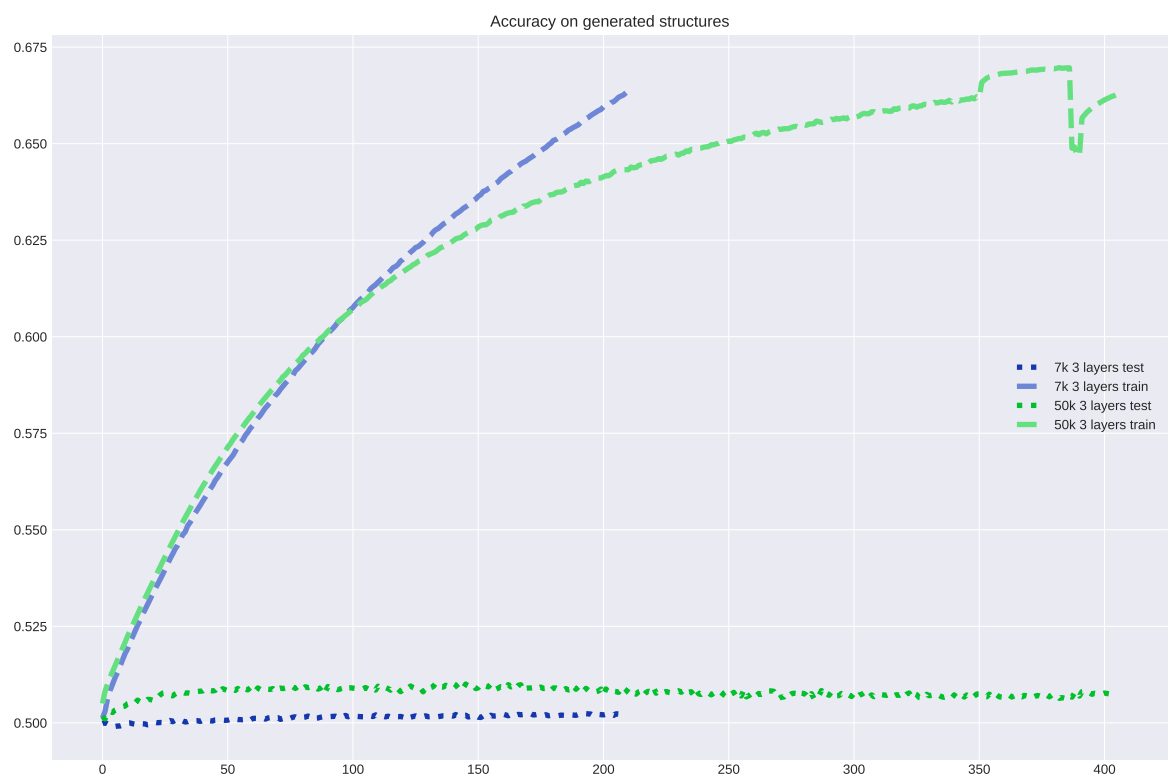


Рис. 7:

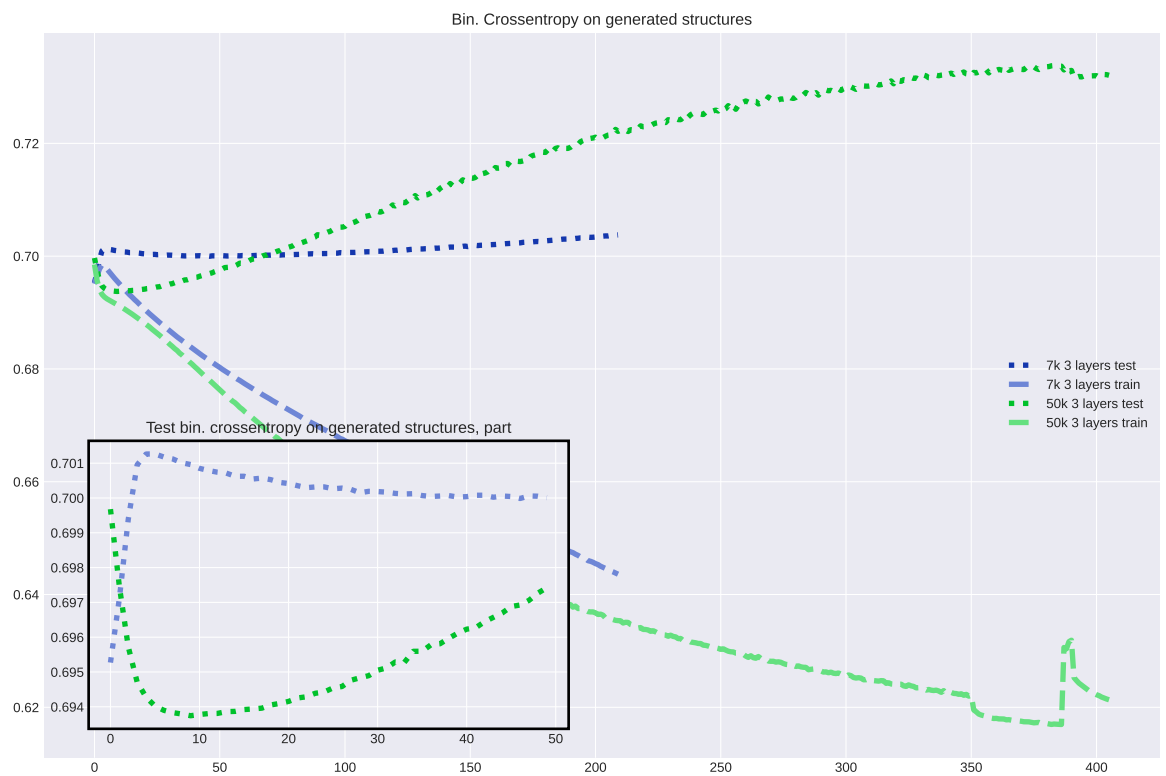


Рис. 8:



Рис. 9:

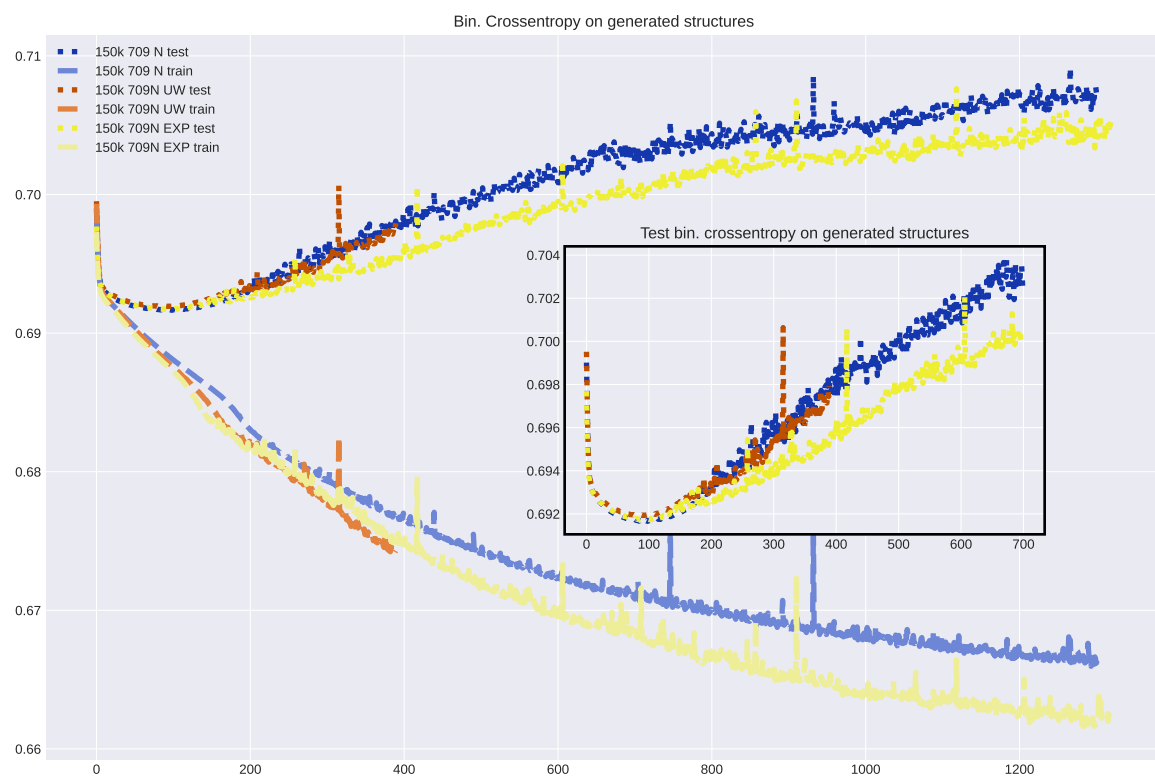


Рис. 10:

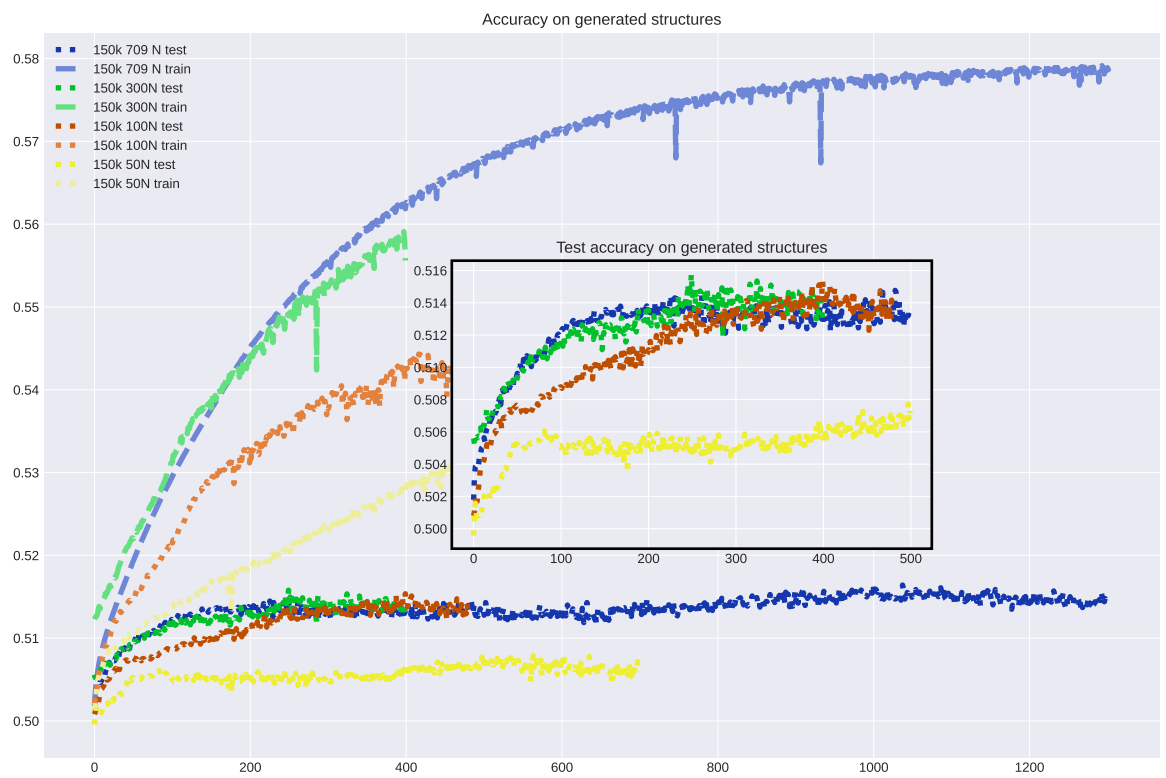


Рис. 11:

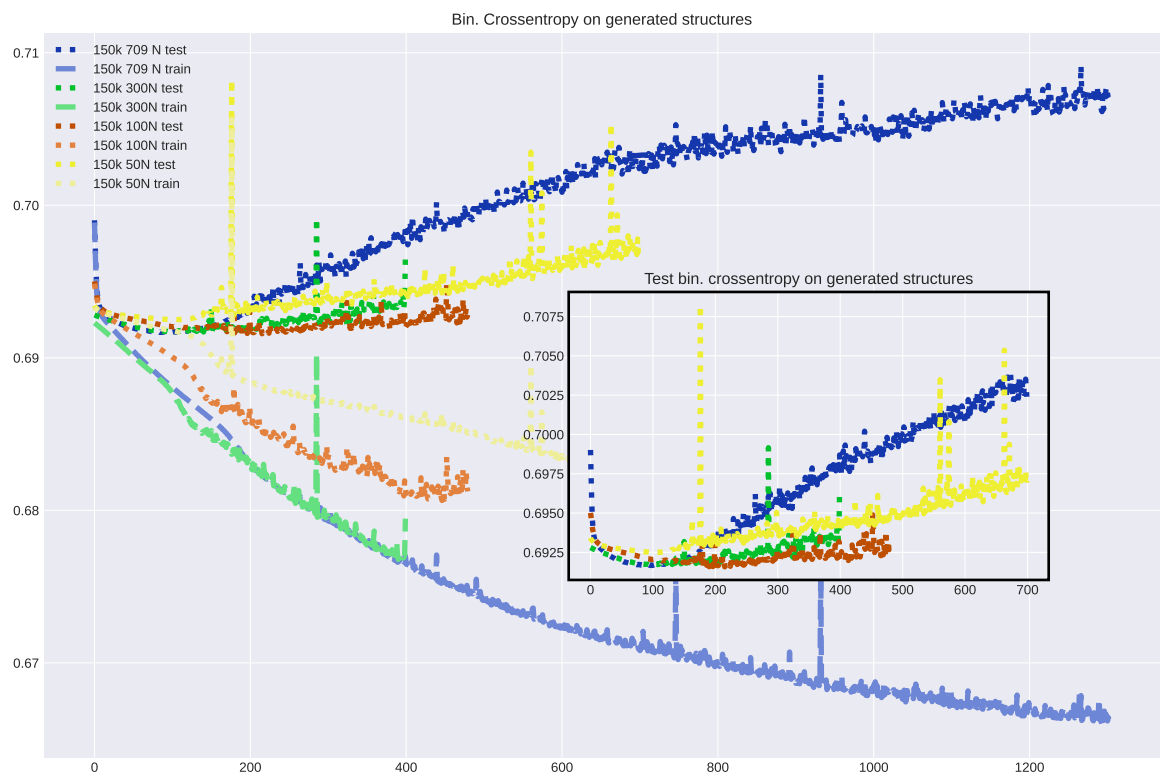


Рис. 12:

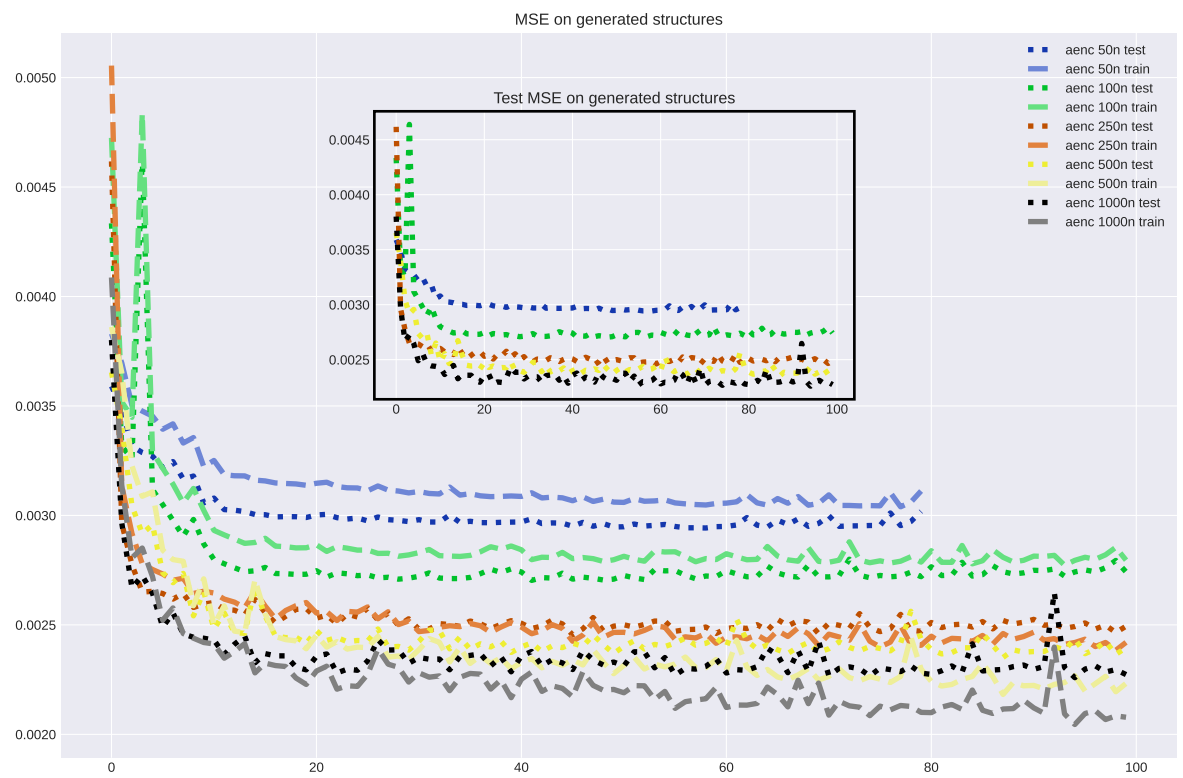


Рис. 13:

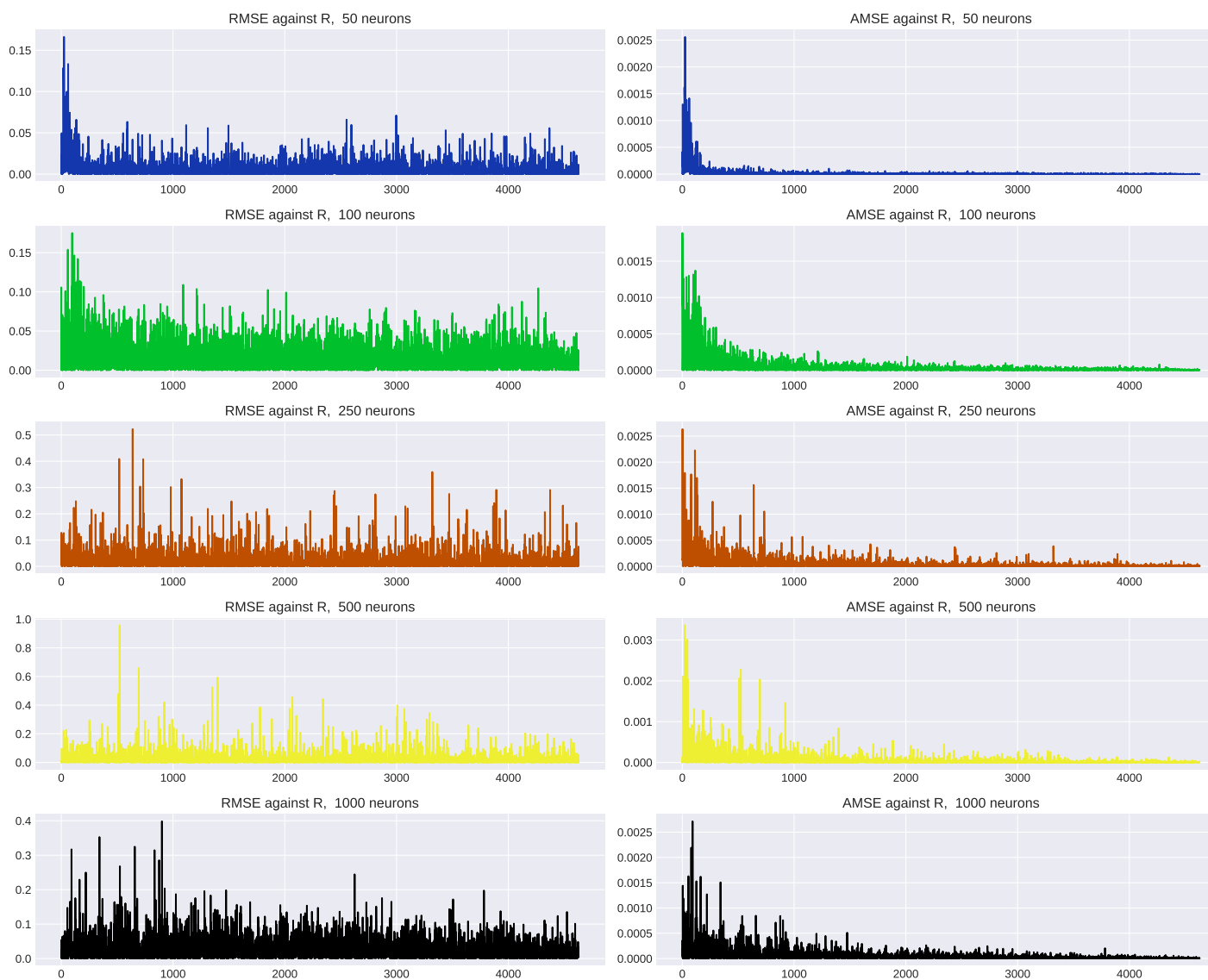


Рис. 14:

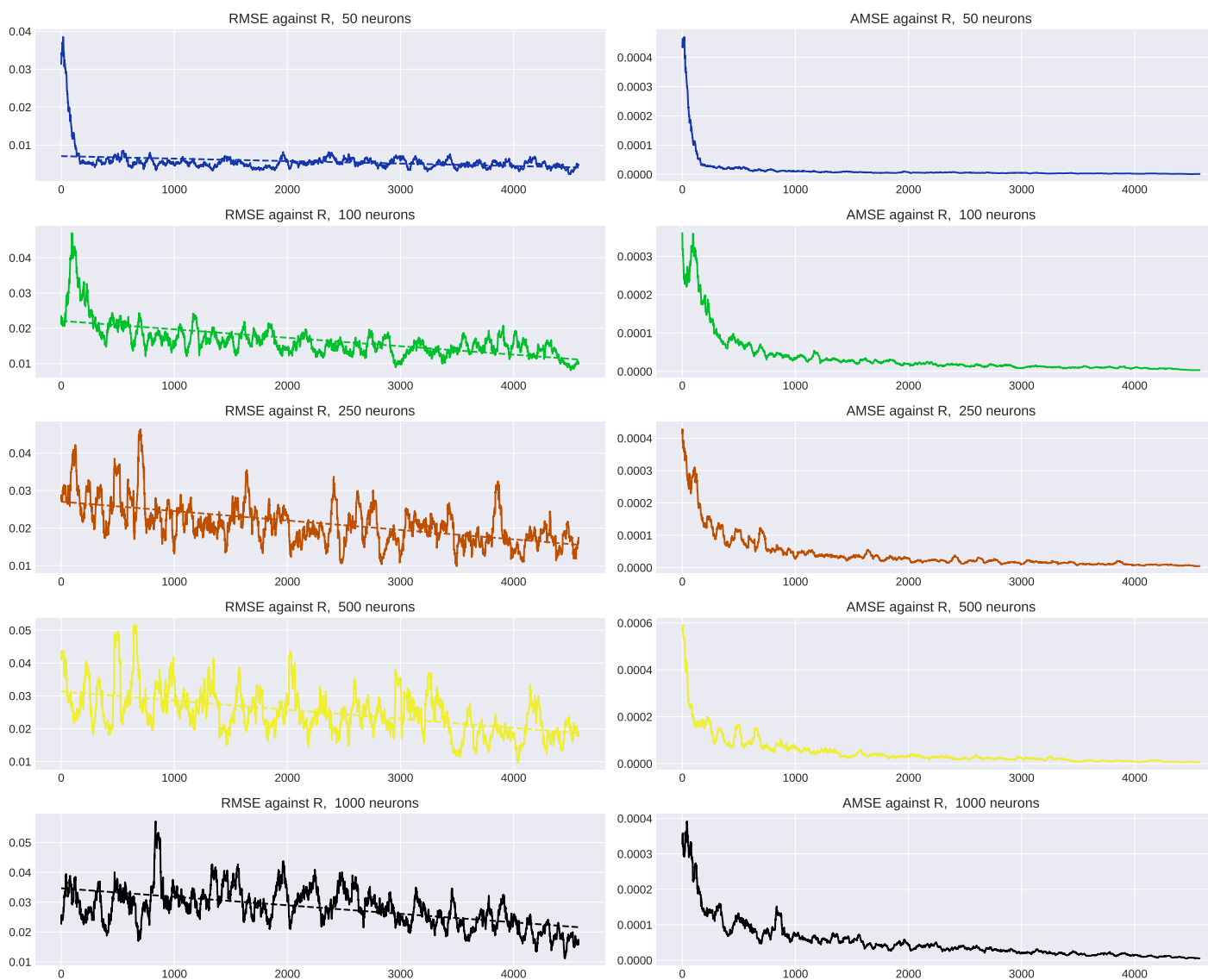


Рис. 15: