

Использование машинного обучения для прогнозирования физических свойств на основе заданной структуры

АВТОРЫ:

Кульшаева (Реснина) Татьяна

Реснин Александр

2024

Вступление

Наша модель способна прогнозировать физические свойства в зависимости от электронной конфигурации атома.

Microsoft создал сервис MatterSim, способный моделировать свойства атомных структур. Нам это показалось интересно и мы решили создать сервис прогнозирования свойств на основе электронной конфигурации атома.

На вход подается электронная конфигурация (порядок расположения электронов по электронным оболочкам атома).

На выходе:

- длина ковалентного радиуса;
- значение электроотрицательности;
- значение теплопроводности;
- значение молярной теплоемкости;
- значение молярной теплоты испарения

Высокая точность прогнозов позволяет использовать наши модели машинного обучения при проектировании, без выполнения многочисленных расчетов.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОВАЛЕНТНОГО РАДИУСА

| | |
|---|--------|
| Точность,% | 95 |
| $(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$ | 11.29 |
| mean_absolute_percentage_error | 0.06 |
| mean_absolute_error | 10.42 |
| mean_squared_error | 127.42 |
| max_error | 14.88 |
| d2_absolute_error_score | 0.68 |
| mean_squared_log_error | 0.00 |

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТИ (шкала Полинга)

| | |
|---|--------|
| Точность,% | 93 |
| $(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$ | 16.85 |
| mean_absolute_percentage_error | 0.10 |
| mean_absolute_error | 13.22 |
| mean_squared_error | 283.88 |
| max_error | 27.97 |
| d2_absolute_error_score | 0.76 |
| mean_squared_log_error | 0.01 |

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ (Вт/(м*К))

| | |
|---|--------------|
| Точность,% | 97 |
| $(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$ | 21258.4 |
| mean_absolute_percentage_error | 0.18 |
| mean_absolute_error | 18017.47 |
| mean_squared_error | 451919700.54 |
| max_error | 29097.08 |
| d2_absolute_error_score | 0.8 |

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
МОЛЯРНОЙ
ТЕПЛОЕМКОСТИ
(Дж/(К*моль))**

| Точность,% | 99 |
|---|---------|
| $(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$ | 34.95 |
| mean_absolute_percentage_error | 0.01 |
| mean_absolute_error | 28.01 |
| mean_squared_error | 1221.18 |
| max_error | 55.32 |
| d2_absolute_error_score | 0.87 |

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
МОЛЯРНОЙ ТЕПЛОТЫ
ИСПАРЕНИЯ (кДж/моль)**

| | |
|---|----------|
| Точность,% | 99 |
| $(\text{mean_squared_error})^{(1/2)}$ | 178.42 |
| mean_absolute_percentage_error | 0.1 |
| mean_absolute_error | 163.37 |
| mean_squared_error | 31833.54 |
| max_error | 261.74 |
| d2_absolute_error_score | 0.88 |

Команда проекта

Кульшаева (Реснина) Татьяна Вячеславовна - 2
высших (второе: инженер-Саратовский
государственный университет им. Н.Г.
Чернышевского, средний балл по диплому -
4.82).

Участник платформы Leader ID (Россия).

Участник проектно-образовательного интенсива
"Архипелаг-2021" (Россия).

Сертификат (доп. образование) «Самосборка и
самоорганизация в наносистемах (МГУ им. М. В.
Ломоносова)

Участник и призер Олимпиад по
нанотехнологиям (МГУ им. М. В. Ломоносова) –
Nanometer.ru

Участник Startup Tour/2022 (Сколково).

Знание английского языка (сертификат TOEFL-
США).

Знание программирования (сертификаты kaggle-
США-2021) – 14 штук.

Стажировка по программированию (Changellenge
- партнер Сколково-2022) – 17 штук.

Участник Всемирного Конгресса математиков
2022

Тел: 8(963)114-14-07

Nauka76@mail.ru

Реснин Александр Григорьевич - инженер
(Саратовский политехнический институт).

Участник платформы Leader ID (Россия).

Участник Startup Tour/2022 (Сколково).