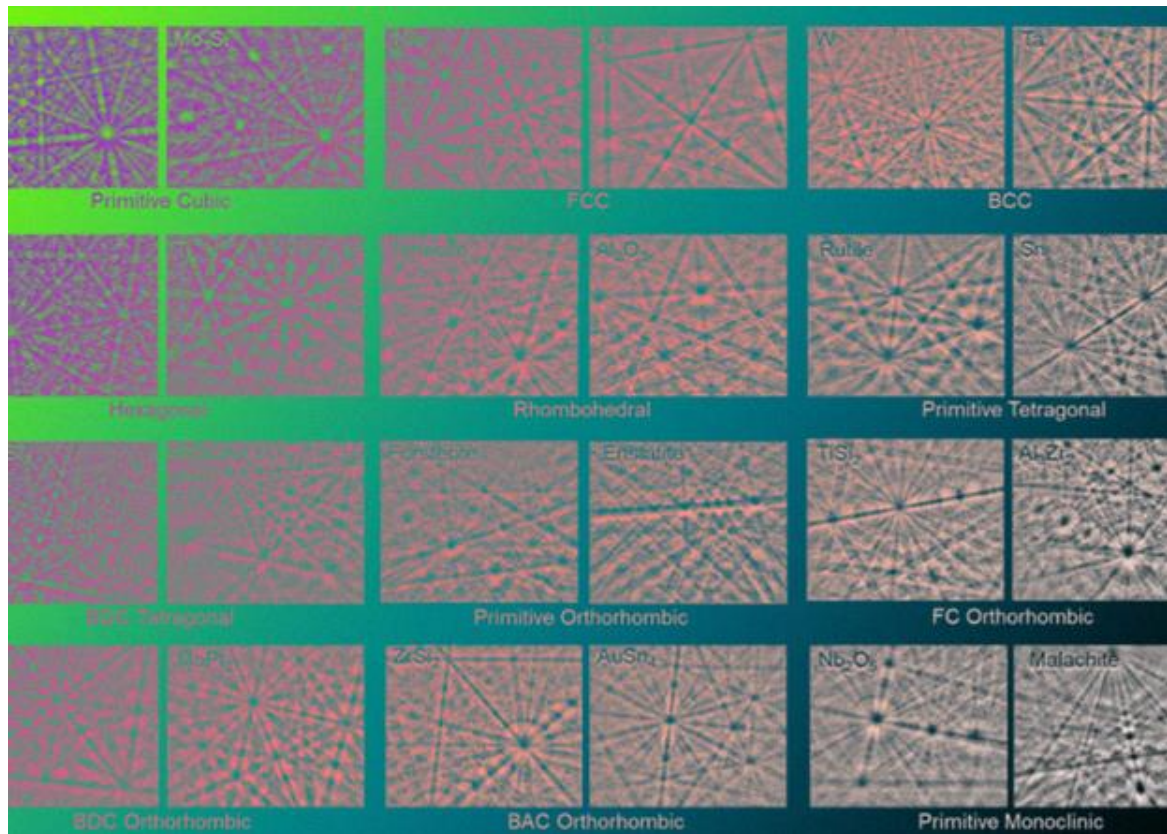


Машинное обучение помогло кристаллографам распознать решетки Браве



Американские ученые разработали и протестировали модель машинного обучения для распознавания характеристик кристаллической структуры образцов (тип решетки Браве и кристаллографическую группу) по изображениям дифракционных картин, полученных методом дифракции отраженных электронов. Кристаллическая структура материала сильно влияет на его свойства, поэтому определение структуры белков, микро- и макромолекул, фармацевтических препаратов, новых материалов и геологических объектов очень важно. Одним из более удобных методов определения структуры кристаллических материалов и геологических объектов становится метод дифракции отраженных электронов, совмещенный со сканирующим электронным микроскопом.

Кевин Кауфманн с коллегами из Калифорнийского университета в Сан-Диего разработали алгоритм машинного обучения, способный определять параметры кристаллической структуры образца (решетку Браве или кристаллографическую группу) по дифракционным картинкам, полученным методом дифракции отраженных электронов. Авторы обучили и протестировали две сверточные нейронные сети. Слои обучались по мере нахождения алгоритмом мотивов, которые отвечали той или иной кристаллографической симметрии на дифракционной картине.

Обученную модель применили на различных сериях образцов, на которых она не обучалась, но которые обладали той же симметрией, и она с высокой точностью

определяла их решетку Браве и кристаллографическую группу. Каждая из двух нейросетей примерно одинаково хорошо (более 90 процентов) классифицировала около 300 тысяч дифракционных картин. Алгоритму без помощи пользователя удалось определить, к какой из 14 решеток Браве принадлежала дифракционная картина.

Для слепого тестирования определения симметрии кристаллов алгоритмами авторы собрали 50 тысяч изображений дифракции отраженных электронов девяти совершенно разных материалов. Каждая из нейросетей правильно определила решетки в 93 и 91 процентов случаев. По словам авторов, метод можно развить до возможности определять полную кристаллическую структуру, разрабатывая нейросети под каждый мультифазный образец или добавив в него больше данных.

Источник: <https://nplus1.ru/news/2020/02/03/machine-learning-for-crystals>