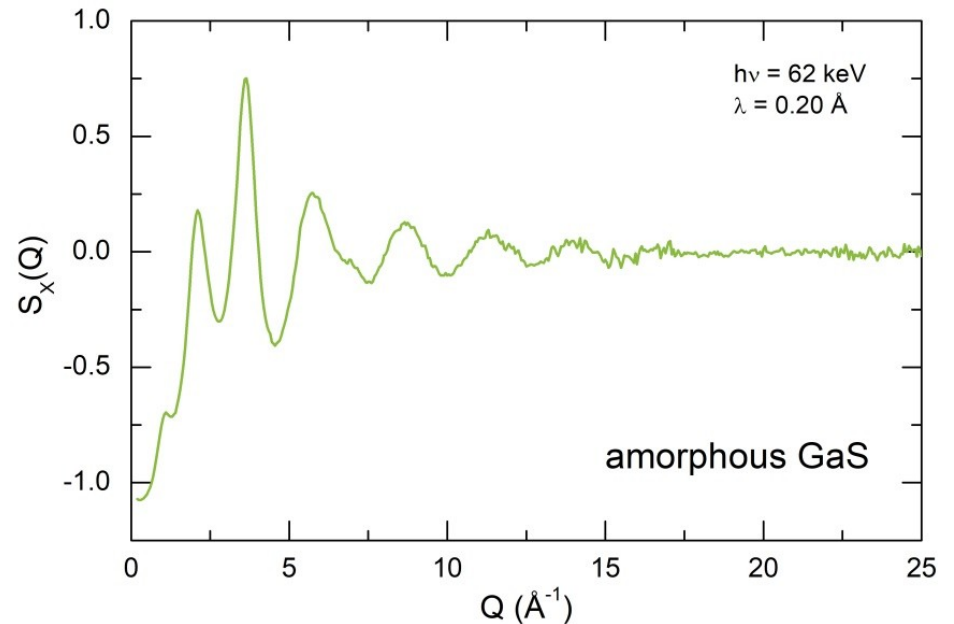


Настройка и использование нейросетей в АЛБТ для анализа и обработки результатов экспериментов

Воронин И.В.

Моделирование новых материалов

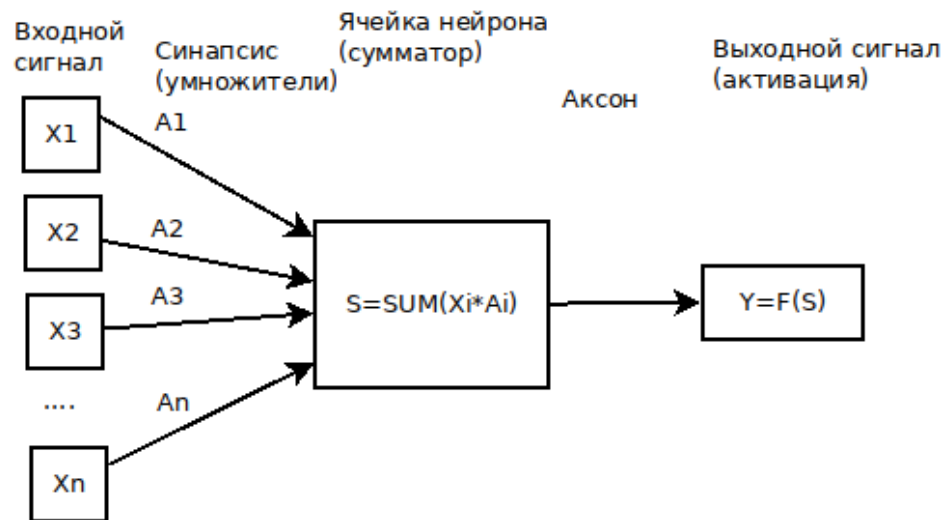
- С заданными электронными и оптическими свойствами
- Конструкция новых молекул
- Использование новых теоретических инструментов таких как: machine-learning potential (MLP) для neural network potential (NNP)



Нейросети для расчетов DFT

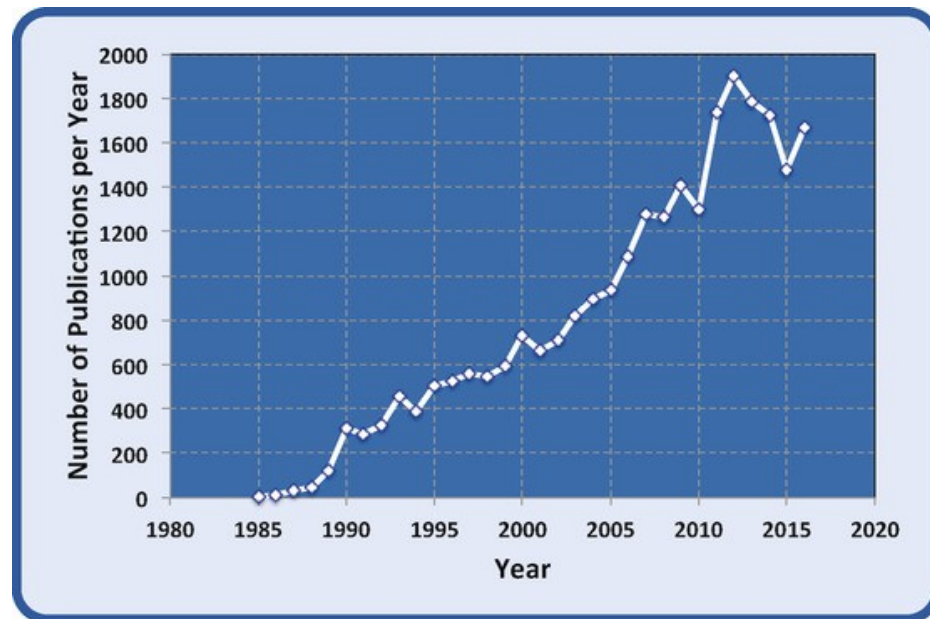
Методы расчета свойств из первых принципов

- Достоинства - точное описание атомного взаимодействия с учётом квантовых эффектов.
- Недостатки — невозможность расчёта за разумное время низкоразмерных структур с достаточно большим числом частиц
- Нейро сети глубокого обучения позволяют ускорить расчет DFT на 2-3 порядка

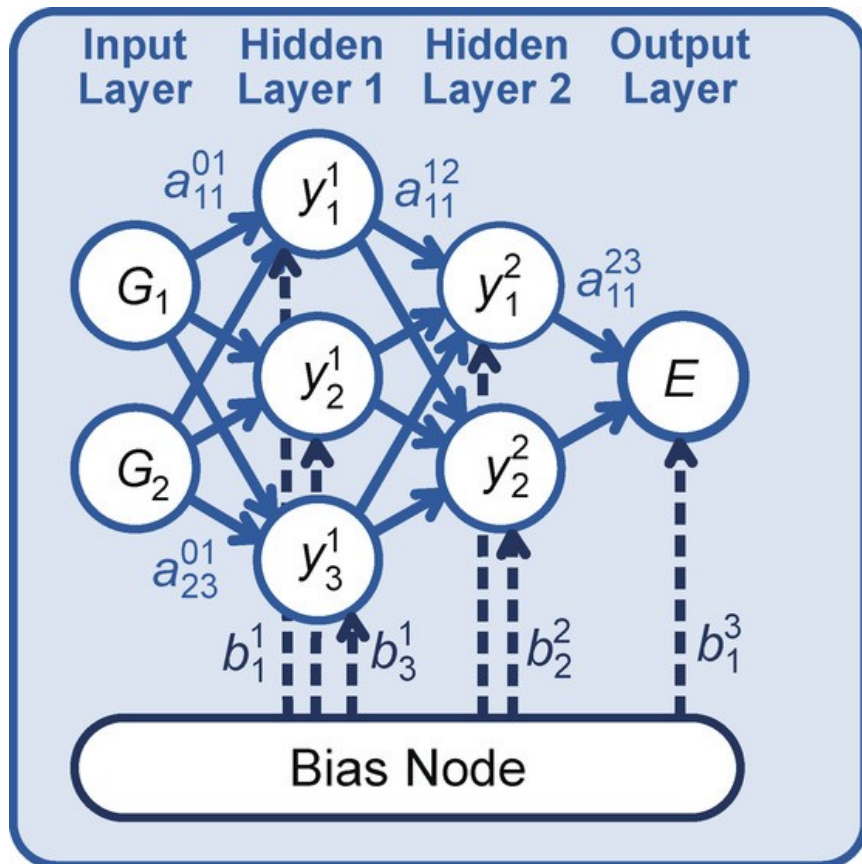


Глубокое машинное обучение

- Поиск решений используя NNP- MLP
- Многомерные потенциалы нейронных сетей (HDNNP)
- Расчет поверхностного потенциала энергии (PES)
- <https://doi.org/10.1002/anie.201703114>

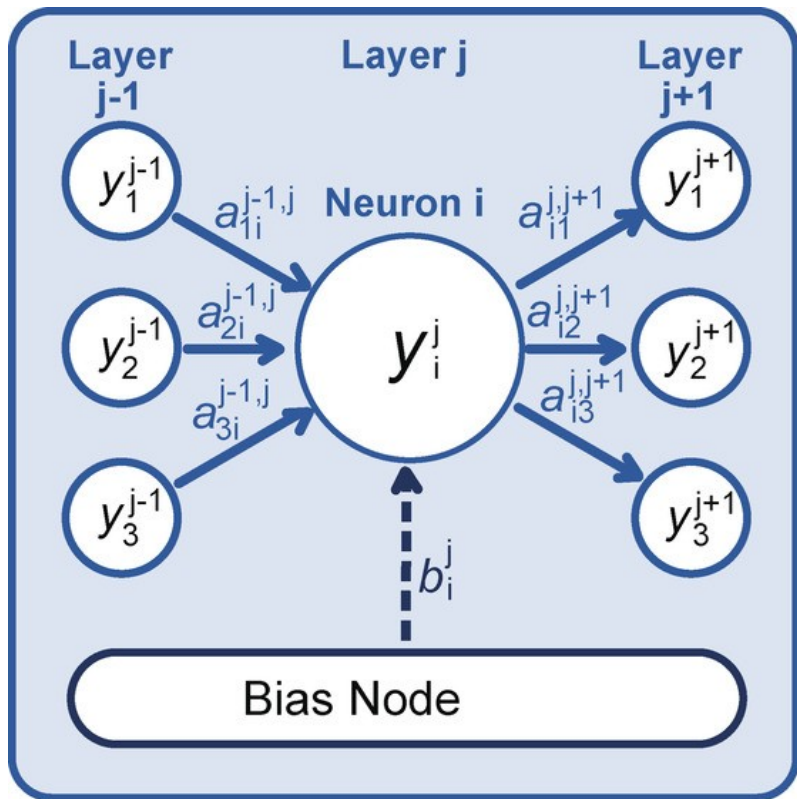


Многослойная модель сети



$$E = f_1^3 \left(b_1^3 + \sum_{l=1}^{N_{hid,2}} a_{kl}^{23} \cdot f_k^2 \left(b_k^2 + \sum_{k=1}^{N_{hid,1}} a_{jk}^{12} \cdot f_j^1 \left(b_j^1 + \sum_{i=1}^{N_G} a_{ij}^{01} \cdot G_i \right) \right) \right)$$

Узел, обучение сети



O'REILLY

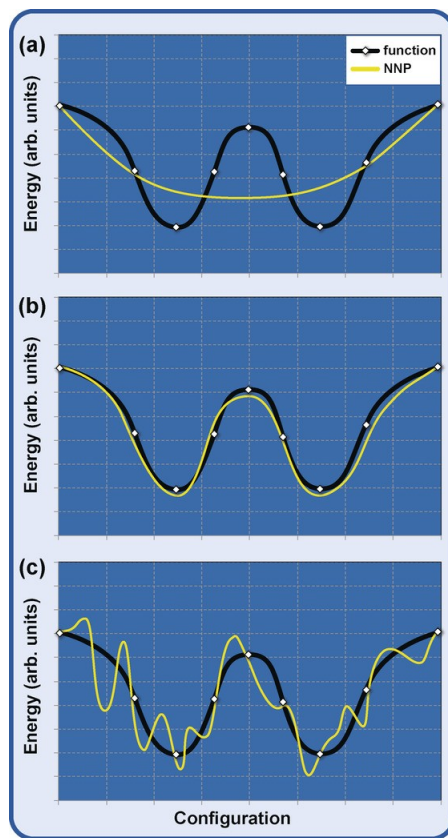


Основы глубокого обучения

СОЗДАНИЕ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ ИСКУССТВЕННОГО
ИНТЕЛЛЕКТА СЛЕДУЮЩЕГО ПОКОЛЕНИЯ

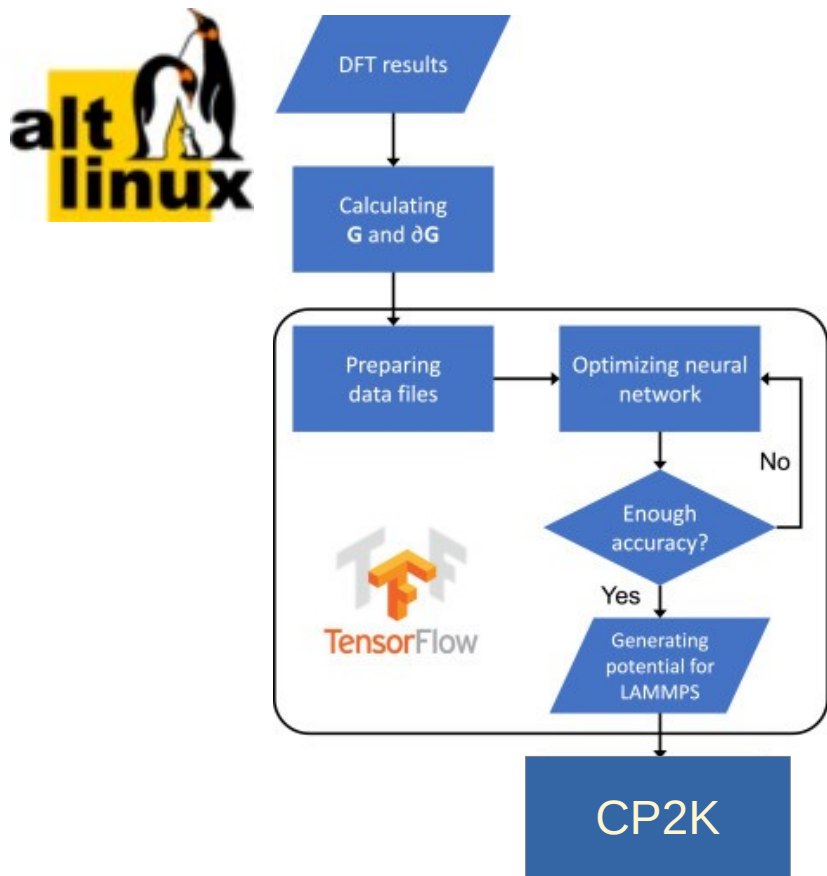
Нихиль Будума
при участии Николаса Локашо

Обучение и тренировка сети



Что нужно — что получаем

- Сервер с CPU и GPU - ОС AltLinux
- инструкция AVX,
- ПО из репозитория <https://libatoms.github.io/>
 - QUIP Универсальная библиотека квантовой механики и межатомных потенциалов
 - GAP(надстройки Fortran для QUIP)
 - quippy(интерфейса Python)
 - Tensor Flow (свободная библиотека Google) с технологией Object detection
 - CP2K, LAMMPS — пакеты для моделирования метастабильных фаз в аморфных структурах



Обязательные компоненты

- GCC, gfortran, Python , библиотеки линейной алгебры.
\$ apt-get install gcc gfortran python python-pip libblas-dev liblapack-dev
- *\$cat /proc/cpuinfo |grep avx*
- Предпочтения *\$ pip install numpy ase f90wrap*
- Для оболочек Python (quippy) минимальные требования: - Python 3 - [NumPy] <http://www.numpy.org> (numpy> = 1.5.0)
- Среда атомарного моделирования
<https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/> (ase> = 3.17.0) + (f90wrap)

Инструменты интерактивных вычислений

- \$ pip install jupyter
- \$ jupyter notebook
- jupyter notebook
QUIP/src/GAP/doc/Examples
Introduction.ipynb
- Docker — для
развертывания на
множестве серверов



Jupyter tutorial Last Checkpoint: 3 minutes ago (autosaved) Logout

File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help Trusted | Python 3 O

Code

PyCon 2018: Using pandas for Better (and Worse) Data Science

GitHub: <https://github.com/justmarkham/pycon-2018-tutorial>

```
In [1]: import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
pd.__version__
```

Out[1]: '0.24.1'

Dataset: Stanford Open Policing Project ([video](#))

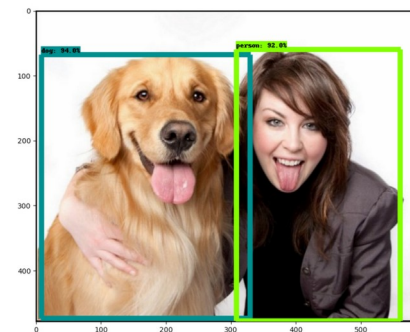
```
In [2]: # ri stands for Rhode Island
ri = pd.read_csv('police.csv')
```

```
In [3]: # what does each row represent?
ri.head()
```

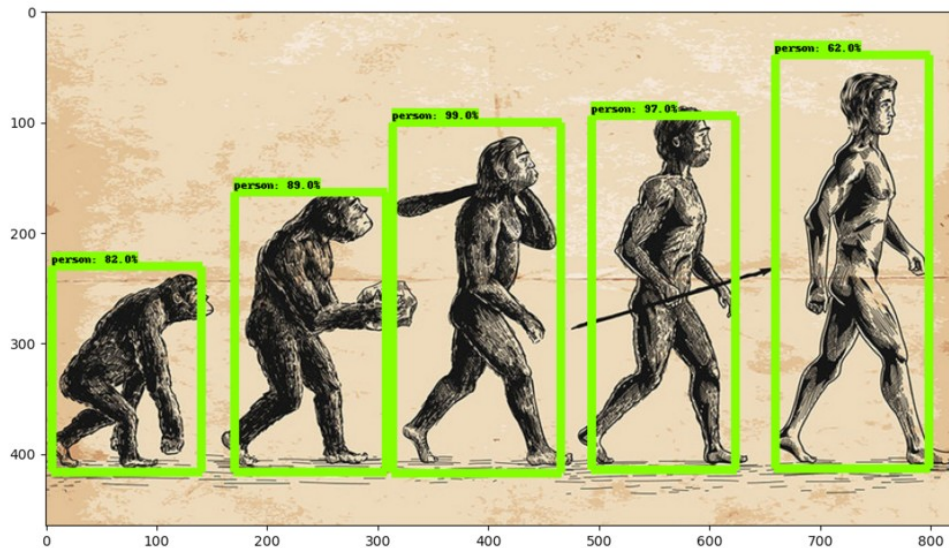
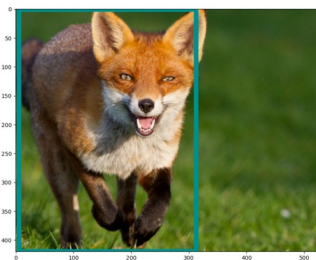
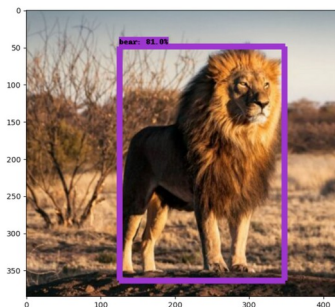
Out[3]:

	stop_date	stop_time	county_name	driver_gender	driver_age_raw	driver_age	driver_race	violation_raw	violation	search_
0	2005-01-02	01:55	NaN	M	1985.0	20.0	White	Speeding	Speeding	
1	2005-01-18	08:15	NaN	M	1965.0	40.0	White	Speeding	Speeding	
2	2005-01-23	23:15	NaN	M	1972.0	33.0	White	Speeding	Speeding	
3	2005-02-20	17:15	NaN	M	1986.0	19.0	White	Call for Service	Other	

Примеры работы сети



Примеры работы сети



Обучение на масках

