

Исследователи из AIRI доказали, что нейросети могут значительно более точно предсказывать свойства материалов, если учитывать симметрию кристаллических структур при обучении.

Это открытие может ускорить разработку новых сплавов и веществ, особенно в зеленой энергетике, где поиск нужных свойств критичен.

Оказалось, что графовые нейросети, обученные на структурах с низкой симметрией, дают почти вдвое меньшее число ошибок в прогнозах по сравнению с моделями, обученными на высокосимметричными образцами. При этом объем обучающей выборки не менялся.

В рамках работы было смоделировано около 6 млн вариантов перовскитных структур с различным замещением элементов. Из них выбрали 1162 представительные структуры и рассчитали их свойства с помощью трудоемких квантово-химических методов. Далее на этих данных обучили ИИ.

Хотя высокосимметричные структуры встречаются редко (менее 1% от всего пространства), они показали высокий разброс свойств — что может быть полезно в условиях неопределенности или при нестандартных задачах.

Методика уже помогает улучшать гибридные подходы, в которых классическая физика сочетается с ИИ. Как отмечают авторы, симметрия — это не просто характеристика материала, а ключ к тому, как машинное обучение «понимает» поведение вещества.