

Российские ученые из НИУ ВШЭ совместно с международными коллегами представили алгоритм машинного обучения Wyckoff Transformer, предназначенный для генерации кристаллов с заданной симметрией. Разработка ускоряет создание новых материалов, которые могут использоваться в электронике, энергетике, медицине и других высокотехнологичных сферах.

Алгоритм был обучен на открытой базе данных Materials Project и построен на архитектуре трансформеров. Его особенность — использование позиций Вайкоффа, которые позволяют математически точно описывать симметричное расположение атомов в кристаллической решетке. Это дает возможность создавать стабильные структуры и предсказывать их свойства, не зная точного расположения всех атомов.

Большинство современных генеративных моделей не учитывают симметрию напрямую, из-за чего полученные материалы могут быть нестабильными. Но Разработка будет представлена 15 июля на конференции ICML в Ванкувере. Код и данные проекта уже доступны под открытой лицензией.