

# Reakciók minimum energia útvonalának optimalizálása gépi tanulás felhasználásával

Szabó András

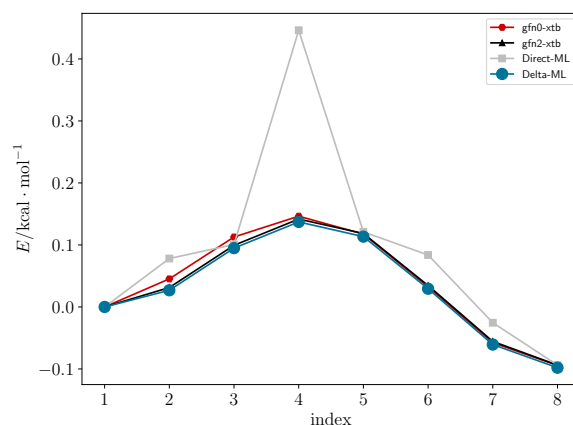
Témavezetők:

Daru János egyetemi adjunktus ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Mészáros Bence Balázs PhD hallgató ELTE Szerves Kémiai Tanszék

A számítógépes kémiában egyre nagyobb teret nyernek a gépi tanuláson (ML) alapuló módszerek, melyek prediktív ereje – a hagyományos társaikkal ellentétben – a matematikai formalizmus és a közelítések javítása nélkül növelhető, pusztán a training adathalmaz kiterjesztésével.

Diákköri kutatásom során az Andreas W. Hauser és kutatócsoportja által kifejlesztett ML-NEB módszert<sup>1</sup> teszteltem egy kiterjedt adatbázison, illetve annak egy Delta-Learning<sup>2</sup> alapú továbbfejlesztett verzióját javasoltam. A 17 reakción végzett elemzésünk alapján az általunk kifejlesztett eljárást az eredeti ML-NEB-hez képest nagyobb robusztusság és kisebb hibák jellemzik. Számszerűsítve: algoritmusunk a Direct-ML alapú NEB módszernél háromszor robusztusabb, miközben az eredeti NEB algoritmushoz képest négyszer kevesebb erőhívást igényel.



1. ábra: A vizsgált módszerek összehasonlítása egy reakció minimum energia útvonala mentén

<sup>1</sup>R. Meyer, K. S. Schmuck és A. W. Hauser. *JCTC* 15 (2019), 6513–6523. old.

<sup>2</sup>R. Ramakrishnan és tsai. *JCTC* 11 (2015), 2087–2096. old.