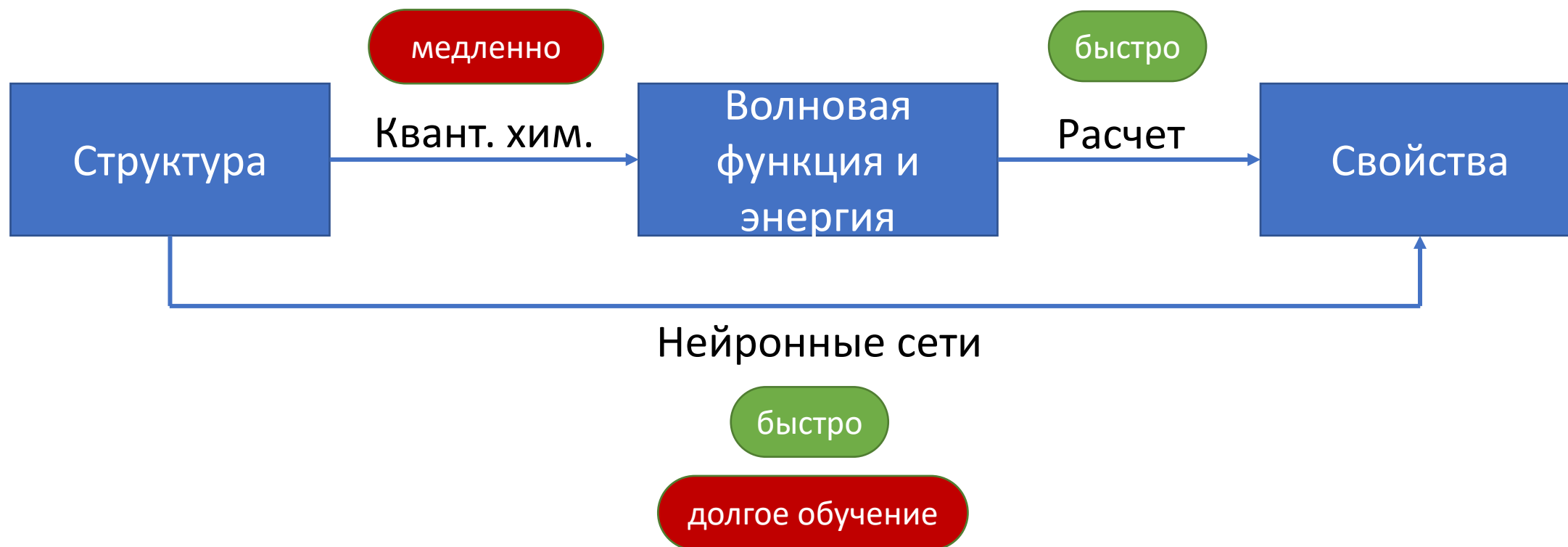


Обобщаемость нейросетевых моделей для предсказания энергии атомизации молекул

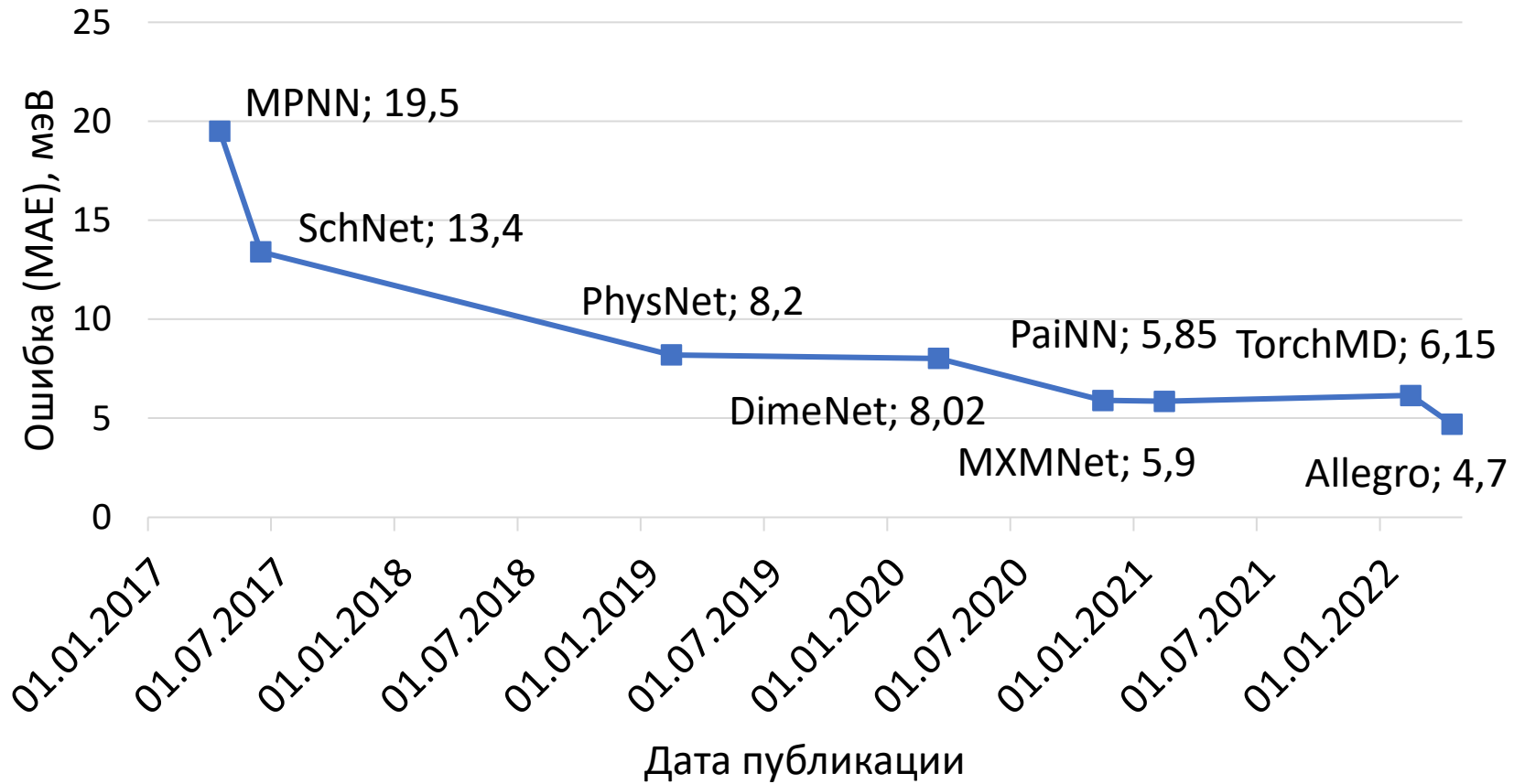
Акостелов Иван Игоревич, В.М. Волохов, Е.С. Амосова, Д.Б.
Лемперт, В.В. Парахин, А.С. Лазаренко

Предсказание молекулярных свойств



Прогресс последних лет

Точность предсказания энергии на QM9



Точность сильно зависит от выборки

	Азокси	Высокоэнерг.	Сахара
PC9	3,76	3,03	0,29
QM9	23,70	21,28	6,66
Alchemy	95,21	66,59	48,13
OD9	65,76	1,53	0,38

Точность предсказания энергии атомизации различных групп веществ (средняя абсолютная ошибка в ккал\моль) в зависимости от тренировочного набора данных

Спасибо за внимание!