

**„Fāzes problēmas kristalogrāfijā risināšana ar dziļo mācīšanos” (Nr. lzp-2024/1-0220)**

**Projekta īstenošanā vadošā iestāde:** Latvijas Universitāte (LU) Medicīnas un dzīvības zinātņu fakultāte (MDZF)

**Projekta sadarbības partneris:** LU Matemātikas un informātikas institūts (LUMII)

**Projekta vadītāji:** Toms Rēķis (LU MDZF), Agris Šostaks (LUMII)

**Projekta īstenošanas periods:** 01.01.2025. – 31.12.2027.

**Projekta kopējais finansējums:** 300 000 EUR (trīs simti tūkstoši eiro 00 centi), tajā skaitā LUMII projekta daļai piešķirtais finansējums: 135 000 EUR

**Projekta mērķis:** Izveidot un uztrenēt vairākus neironu tīklus, kas risina fāzes problēmu mazu molekulu kristalogrāfijā. Tas ļaus radīt metodes lielu elementāršūnu struktūru noteikšanai, kā arī struktūru noteikšanai no zemas izšķirtspējas un zema pilnīguma datiem, kur pašreiz esošās metodes nespēj nodrošināt struktūru atrisināšanu. Lai sasniegtu projektu mērķus, tiks izstrādātas a) efektīvas un ātras mākslīgo kristālu struktūru ģenerēšanas procedūras (reālā laikā), lai tās izmantotu uzraudzītā mašīnmācīšanās procesā; b) procedūras difrakcijas datu ģenerēšanai ar mainīgu izšķirtspēju un pilnīgumu, kas atbilst eksperimentālo apstākļu (piemēram, augstspiediena eksperimenti vai elektronu difrakcija) pieejamībai atgriezeniskajā telpā; c) projektēti un apmācīti neironu tīkli fāzes problēmas risināšanai, izmantojot mākslīgi ģenerētus difrakcijas datus; d) izstrādātas metodes apmācīto neironu tīklu plaša mēroga testēšanai ar eksperimentālajiem difrakcijas datiem, kas pieejami dažādos repozitorijos; e) izstrādāti rīki, lai integrētu apmācītos neironu tīklus standarta kristālu struktūru risināšanas darbplūsmās. Projekta rezultāti tiks publicēti 4 publikācijās starptautiski recenzētos žurnālos.

Projekts tiek īstenots saskaņā ar Ministru kabineta 2017. gada 12. decembra noteikumiem Nr. 725 „Fundamentālo un lietišķo pētījumu projektu izvērtēšanas un finansējuma administrēšanas kārtība” un Latvijas Zinātnes padomes 2024. gada 15. martā apstiprinātajam Fundamentālo un lietišķo pētījumu projektu 2024. gada atklātā konkursa nolikumam.