

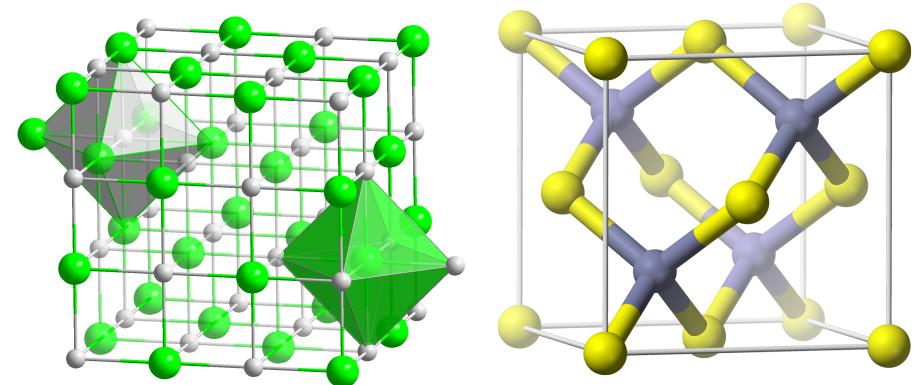
DEFORMACE ATOMÁRNÍCH ORBITALŮ METODAMI STROJOVÉHO UČENÍ

DOC. JAN VYBÍRAL

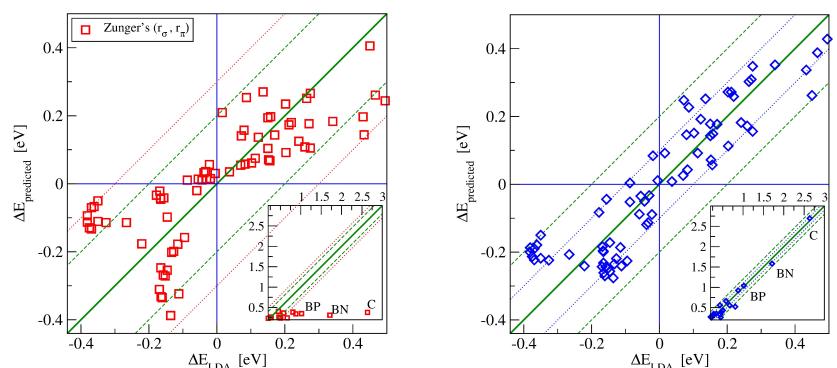
Popis tématu

- Vlastnosti materiálů lze dnes velice přesně spočítat pomocí *density functional theory (DFT)* a *local-density approximation (LDA)*. Tyto výpočty jsou sice velice přesné, ale také časově velice náročné. Při velkém množství potenciálních materiálů využitelných v průmyslu není možné takto náročné výpočty provádět pro všechny materiály.
- Proto se nabízí následující postup: několik vybraných materiálů propočteme přesně a posléze se pomocí metod strojového učení pokusíme nalézt levný a rychlý (byť nepřesný) způsob předpovídání materiálových vlastností. Tuto předpověď je pak možné aplikovat na obrovské množství materiálů a nejslibnější předpovězené materiály pak propočteme opět přesně.

Typy krystalů Rock Salt a Zincblende



Příklad vizualizace predikovaných hodnot



Nástroje

- Cílem diplomové práce bude zpracování předpočtených dat vazebních energií dvouatomárních krystalů, která pocházejí od kolegů z Fritz-Haber-Institute (FHI) v Berlíně.
- Pokusíme se vyvinout metodu předpovídání těchto energií z jednoduchých atomárních charakteristik daných sloučenin.
- Kromě použití klasických metod bude cílem i navrhnut nové metody využívající analytické závislosti vlastních čísel operátorů na parametru.
- V případě zajímavých výsledků bude moci řešitel navštívit FHI a prezentovat své výsledky přímo tam.

Jak by mohlo vypadat vaše zadání

- Seznámení se s fyzikální motivací problému
- Seznámení se s daty z FHI (Berlín)
- Využití klasických metod (kernel ridge regression, lasso, ...) k odhalení funkčních závislostí v datech
- Využití analytické závislosti energií sloučenin na parametrech materiálu
- Prezentace výsledků na FHI v Berlíně