

Využití neuronových sítí při tvorbě potenciálů pro molekulární dynamiku.

V posledních dekáдах jsou neuronové sítě čím dál častěji školňovaným tématem. Díky jejich schopnosti přesné a věrohodné predikce nacházejí uplatnění v mnoha oborech včetně materiálového inženýrství. Jedna z možností jejich využití se nachází v molekulární dynamice, která nabízí možnost simulovat časový vývoj velkých systému, nicméně její přesnost je značně omezená. V této práci se budeme zabývat využitím neuronových sítí při tvorbě potenciálů pro molekulární dynamiku a následné použití vytvořeného potenciálu na monoatomární systém křemíku.

Primary author: JAROŠ, Petr (CTU FNSPE)

Co-author: KALVODA, Ladislav (CTU FNSPE)