

Коллоквиум ФКН

24 Сентября, 16:20-17:40

«Машинное обучение в атомистическом моделировании»



Иван Новиков
Сколтех

За последние 15 лет машинное обучение стало широко применяться в атомистическом моделировании. В частности, были разработаны так называемые машинно-обучаемые потенциалы (МОПы) межатомного взаимодействия – модели, описывающие взаимодействие атомов (предсказывающие энергии и силы взаимодействия) в различных атомистических системах. МОПы, обученные на данных достаточно точных квантово-механических вычислений, позволяют эффективно предсказывать свойства материалов и проводить атомистическое моделирование при различных условиях.

В докладе будет обсуждаться один из разработанных машинно-обучаемых потенциалов межатомного взаимодействия, а именно, Moment Tensor Potential (MTP) и алгоритмы его обучения. Кроме того, будет обсуждаться обобщение MTP на случай его применения к магнитным материалам. Также будут продемонстрированы результаты решения нескольких задач атомистического моделирования.



Online



ФКН