

Využití umělé inteligence ve výpočetní materiálové vědě

- 1) Garant stáže: Mgr. Martin Friák, Ph.D.
- 2) Skupina: Skupina elektrických a magnetických vlastností:
<https://www.ipm.cz/skupiny/skupina-elektrickyh-a-magnetickyh-vlastnosti>
- 3) Počet volných míst pro téma: 1
- 4) Úroveň pokročilosti: Startovací téma
- 5) Jazyk: Čeština / Angličtina
- 6) Pracoviště: Ústav fyziky materiálů, AV ČR, v. v. i., Žitkova 22, Brno
- 7) **Stručná anotace:** Výpočetní materiálová věda se v posledních desetiletích vyprofilovala jako samostatná a dobře etablovaná alternativa k experimentálnímu výzkumu, která se opírá o masivní využití výpočetní techniky a numerických simulací. Ty nejpřesnější, ale také výpočetně nejnáročnější, simulace ze světa atomů, kde má většina procesů v materiálech svůj původ, se opírají o zákony kvantové mechaniky. Na řešení mnoha palčivých problémů ale současné (super-) počítačové kapacity nestačí. Velmi slibně se proto jeví propojovat výpočty s nástroji umělé inteligence (neuronové sítě apod.) tak, aby došlo ke zrychlení výpočtů. Cílem této výzkumné aktivity je seznámení se s možnostmi propojení kvantově-mechanických výpočtů a AI ve výpočetní materiálové vědě. Znalost programovacího jazyka Python je (velkou) výhodou.