**CSE703014 – ĐỒ ÁN LIÊN NGÀNH**

**ĐỀ XUẤT DỰ ÁN**

**TÊN DỰ ÁN**: Ứng dụng mô hình học sâu cho mô phỏng động lực học phân tử

**NHÓM SINH VIÊN**: Trần Minh Hiếu – 21011601, Từ Lê Tú Uyên - 21012401

**THỜI GIAN THỰC HIỆN**: 06/2024 – 07/2024

**PHẠM VI CÔNG VIỆC:**

Nhiệm vụ 1: Thu thập và tiền xử lý dữ liệu

Mô tả: Tìm kiếm và thu thập dữ liệu cấu trúc phân tử silicon từ các nguồn khác nhau. Tiến hành tiền xử lý dữ liệu bao gồm đọc và trích xuất thông tin từ các tệp XYZ, kiểm tra và xác nhận dữ liệu.

Nhiệm vụ 2: Phát triển mô hình học sâu

Mô tả: Xây dựng và huấn luyện mô hình học sâu để dự đoán năng lượng và lực phân tử từ các tương tác cặp đôi của các nguyên tử. Sử dụng mạng nơ-ron tích chập để trích xuất các đặc trưng ẩn từ dữ liệu tương tác cặp đôi.

Nhiệm vụ 3: Đánh giá và tối ưu hóa mô hình

Mô tả: Đánh giá hiệu suất của mô hình thông qua các chỉ số RMSE và MAE. Tối ưu hóa mô hình bằng cách điều chỉnh các tham số và cấu trúc mạng để cải thiện độ chính xác và khả năng chuyển đổi của mô hình.

Nhiệm vụ 4: Phân tích kết quả thực nghiệm

Mô tả: Phân tích kết quả dự đoán năng lượng và lực phân tử từ mô hình, so sánh với kết quả từ các phương pháp truyền thống như lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). Trình bày kết quả thông qua biểu đồ và bảng.

Nhiệm vụ 5: Viết báo cáo và thuyết trình

Mô tả: Tổng hợp toàn bộ quá trình thực hiện dự án, các phương pháp, kết quả và phân tích vào báo cáo cuối cùng. Chuẩn bị bài thuyết trình để trình bày trước hội đồng đánh giá.

**KẾT QUẢ DỰ ÁN:**

1. Bộ dữ liệu đã được tiền xử lý và sẵn sàng cho việc huấn luyện mô hình.
2. Mô hình học sâu dự đoán năng lượng và lực phân tử từ các tương tác cặp đôi của các nguyên tử.
3. Báo cáo chi tiết về quá trình thực hiện, các phương pháp và kết quả đạt được.
4. Bài thuyết trình tóm tắt dự án và kết quả nghiên cứu.
5. Mô hình có độ chính xác cao và khả năng áp dụng vào các hệ thống lớn hơn.

|  |  |
| --- | --- |
|  | Hà Nội, Ngày: 20/9/2023  Xác nhận của GVHD |