

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student: Bc. Jiří Chmel

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Studijní obor: Aplikované matematicko-stochastické metody

Název práce (česky): Aplikace strojového učení k predikci energií ve fyzice pevných látek

Název práce (anglicky): Machine learning for prediction of energy in condensed matter physics

Pokyny pro vypracování:

- 1) Student se seznámí s metodou používanou k získávání dat o chemických sloučeninách.
- 2) Student se seznámí s přístupy používanými k získání vektorů popisu materiálů (tzv. deskriptory) ve fyzice pevných látek a vybrané aplikuje.
- 3) S využitím metod strojového učení student prozkoumá vztah mezi vlastnostmi materiálu (vazebná energie, šířka zakázaného pásu) a jeho geometrií.
- 4) Získané algoritmy student aplikuje na dostupné datasety z Fritz-Haberova Institutu v Berlíně a výsledky porovná s dostupnou literaturou.

Doporučená literatura:

- 1) L. M. Ghiringhelli, J. Vybíral, S. V. Levchenko, C. Draxl, M. Scheffler, Big data of materials science - Critical role of the descriptor. Phys. Rev. Lett. 114, 2015, 105503.
- 2) L. M. Ghiringhelli, J. Vybíral, E. Ahmetchik, R. Ouyang, S. V. Levchenko, C. Draxl, M. Scheffler, Learning physical descriptors for materials science by compressed sensing. New Journal of Physics 19, 2017, 023017.
- 3) C. Sutton, L. M. Ghiringhelli, T. Yamamoto, Y. Lysogorskiy, L. Blumenthal, T. Hammerschmidt, J. R. Golebiowski, X. Liu, A. Ziletti, M. Scheffler, Crowd-sourcing materials-science challenges with the NOMAD 2018 Kaggle competition, Npj Comput. Mater. 5, 2019, 111.
- 4) C. M. Bishop, Pattern recognition and machine learning, Springer, 2006.
- 5) T. Hastie, R. Tibshirani, J. Friedman, The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction. Springer, New York, 2009.

Jméno a pracoviště vedoucího diplomové práce:

doc. RNDr. Jan Vybíral, Ph.D.

Katedra matematiky FJFI, ČVUT v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Doc. Ing. Václav Šmídl, PhD.

ÚTIA AV ČR, Pod vodárenskou věží 4, 180 00 Praha 8

Datum zadání diplomové práce: 31.10.2020

Datum odevzdání diplomové práce: 3.5.2021

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.