

Streszczenie

W pracy zastosowano algorytmy uczenia maszynowego i sztucznej inteligencji do opisu i przewidywania własności nanostruktur niskowymiarowych. Opisano proces budowania modeli bazujących na algorytmach uczenia maszynowego w odniesieniu do układów jednowymiarowych: nanorurek borowych i nanorurek azotku boru oraz materiałów dwuwymiarowych MXenes. Układy te są w centrum zainteresowania badaczy ze względu na ich niezwykle własności oraz potencjalne zastosowania w medycynie oraz farmacji.

Zbudowano modele pozwalające na realistyczne przewidywanie całkowitej energii, energii kohezji oraz toksyczności badanych związków. Badania wymagały stworzenia szeregu modeli w oparciu o algorytmy uczenia maszynowego. Wykorzystano najbardziej zaawansowane algorytmy oraz zaadaptowano je na potrzeby problemów przedstawionych w dysertacji. Ponadto przetestowano wszystkie dostępne metody reprezentacji geometrii układów krystalicznych.

Podczas prac wykorzystano unikalne połączenie danych eksperymentalnych z danymi teoretycznymi pochodzącymi z symulacji numerycznych. Dane teoretyczne pochodziły z otwartych baz danych zawierających wyniki symulacji oraz z ponad 8500 przeprowadzonych podczas pisania rozprawy symulacji numerycznych. Otrzymane wyniki opierają się na analizie algorytmami sztucznej inteligencji unikalnych zbiorów danych. Ponadto zastosowane techniki umożliwiły wyjaśnienie stworzonych modeli oraz sposobu opisywania przez nie procesów fizycznych. Pozwoliło to na poszerzenie wiedzy o badanych układach. Oryginalne i nowatorskie zastosowanie sztucznej inteligencji w badaniach naukowych. Szczególnie ważne wydają się wyniki opisujące mechanizm toksyczności materiałów MXenes