

Tato práce se zabývá vývojem nové metodologie pro zefektivnění simulací centroid molekulární dynamiky — výpočetní metody založené na teorii dráhových integrálů v imaginárním čase, používané pro přesnou predikci vibračních spekter a jiných dynamických vlastností molekulárních systémů v kondenzované fázi. Tato metodologie spočívá ve využití metod strojového učení k explicitní konstrukci potenciálu pro centroid. Výsledky obdržené využitím nového přístupu jsou poté systematicky porovnány se starším adiabatickým přístupem k centroid molekulární dynamice. Výsledky jsou porovnány jak pro řadu modelových systémů, tak pro realistické mnohdimenzionální molekulární systémy. Tomu následuje diskuze rozdílu mezi oběma přístupy, na kterých jsou také ilustrovány výhody nové metodologie. Vlastnosti potenciálu, který je v rámci přístupu konstruován, byly také prozkoumány.