

Abstrakt

30. prosinec 2023

Tato práce zkoumá nové přístupy k učení fyzikálních modelů, vynucování vazeb v rovnicích a k optimalizaci penalizačních funkcí závislých na trajektorii. Nedávné pokroky ve výzkumu hlubokého učení a umělé inteligence jsou v této práci propojeny se zavedenými poznatky o dynamických a chemických systémech a otevírají tak nové možnosti mezioborového propojení. Tato práce prezentuje významný příspěvek k simulačním technikám, které využívají automatickou diferenciaci pro propagaci dynamiky, a ukazuje nejen jejich slibné využití v praxi, ale zároveň formuluje nové teoretické výsledky z oblasti o chování se gradientů v evolucích kontrolovaných neuronovými sítěmi. Všechny nové nástroje jsou důsledně testovány na příkladech z fyziky a chemie, čímž vytvářejí potenciál pro jejich další aplikaci v praxi.