

Descrizione dell' attività di ricerca

Sviluppo di metodi multiscala e high throughput per simulare il comportamento tribologico di interfacce solide.

In particolare, si dovranno ottimizzare e generalizzare metodi già sviluppati dal gruppo che accoppiano Quantum Mechanics e Molecular Mechanics, dinamica molecole basata su Green's function, e workflows per gestire i calcoli high throughput e creare data bases. Verrà anche esplorata la possibilità di usare algoritmi basati su machine learning sia per force fields accurati che per analisi predittiva dei dati prodotti dai calcoli high throughput.

Description of the research activity

Development of multiscale and high throughput methods to simulate the tribological behavior of solid interfaces.

In particular, optimization and generalization of methods already developed by the group that couple Quantum Mechanics and Molecular Mechanics, molecular dynamics based on Green's function, and workflows to manage high throughput calculations and create data bases. The possibility of using machine learning-based algorithms for both accurate force fields and predictive analysis of the data produced by high throughput calculations will also be explored.