

Forschungs-Seminar „Vielteilchen-Theorie“

im Fokus: Simulation heterogener Systeme (insbesondere Plasma-Festkörper-Interface) und Machine Learning

dienstags 10.15-11.45, LS 15-230, sowie online:

<https://uni-kiel.zoom.us/j/85970860292?pwd=L1Nzc1BUdERHVU1xN1FaZE5LQ0IBZz09>

Ziele:

- Einführung zu Machine learning für Studierende. Anleitung zu Seminarvorträgen*.
- Diskussion von Simulationsmethoden im SFB 1689 „Plasma Nonequilibrium at interfaces“ und von Kooperationen zwischen den Arbeitsgruppen
- Nutzung von Machine learning-Methoden, insbesondere für heterogene Systeme

Inhalt: (Stand 4.1.)

Teil I: Theorie- und Simulation im SFB 1689

1. Übersicht zu Methoden, Multiskalenproblemen, offenen Fragen: M. Bonitz, ITAP (24.10.)
2. Überblick zu klassischen Plasma-Simulationen im SFB: M. Becker, INP (7.11., zoom)
3. Überblick über Oberflächen-Simulationen: F. Caruso, M. Bonitz, ITAP (14.11.)
4. Gekoppelte Plasma-Oberflächen-Simulationen: F.X. Bronold, UGW (21.11.)
5. Überblick zur Plasmakatalyse an Oberflächen: A. Hehn, Chemie (28.11.)

Teil II: Einführung in Machine Learning-Methoden: J. Trieschmann, TF

1. Grundlagen von Machine Learning-Methoden (5.12.)
2. Überblick zu ML in Plasma-Simulationen (mit Beteiligung von T. Gergs, 12.12.)
- 19.12.: Plasmakatalyse an Oberflächen, Michael Schulz, Chemie,

Teil III: Anwendung von ML im SFB 1689, Kooperationen

9.1. Multiskalen-Konzepte, z.B. embedding-Verfahren: M. Bonitz u.a.

Diskussion zu Kooperationen im SFB 1689 auf Basis der Vorträge: alle

16.1. Modeling of plasma surface chemistry and catalysis: Erik Neyts, U Antwerp

23.1. Fallbeispiele zu PINNs: Ihda Chaerony Siffa (INP, TET);

Diskussion zu Kooperationen im SFB, und zu gemeinsamen papern

Teil IV: Studentische Vorträge (optional)

30.1. Giorgio Lovato: Trace consistency in the BBGKY hierarchy

*für Physik-Studierende anrechenbar in den Modulen MNFphys-1143 und -1244 (2SWS)

Teilnehmer: Masterstudierende, Doktoranden, postdocs.

Grundkenntnisse in Quantenmechanik und Programmierung sind hilfreich

Organisation: Prof. Michael Bonitz, ITAP, Prof. Jan Trieschmann, T-Fak

Vorbesprechung: Dienstag 24.10. 10.15, LS 15-230