

Forschungs-Seminar „Vielteilchen-Theorie“*

im Fokus: First principle Simulationen und Machine Learning

dienstags 12.15-13.45, LS 15-230, sowie online:

<https://uni-kiel.zoom.us/j/85970860292?pwd=L1Nzc1BUdERHVU1xN1FaZE5LQ0lBZz09>

Inhalt**

Teil I: Grundlagen

1. Einführung in die Vielteilchentheorie: Michael Bonitz (Physik) - 1/2 Vorlesung (25.10.)

2. Überblick über First principle-Simulations-Verfahren:

a) klassische Systeme: Hanno Kählert (Physik): Thermodyn. Monte Carlo, Molekulardynamik – 1V (25.10./1.11.)

Steffen Börm (Mathematik): klassische Multipol- und hierarchische Verfahren – 1/2 V (1.11.)

b) Quantensysteme: Michael Bonitz: Gleichgewicht: Quanten Monte Carlo – ½ V (8.11.)
Michael Bonitz und Jan-Philip Joost (Physik): Nichtgleichgewicht: Quantenkinetische Theorie und Reduzierte Dichtematrizen, G1-G2-Schema, Purification – 1.5 Vorlesungen (8.-15. 11.)

c) Anna Hehn (Chemie) und Attila Cangi (CASUS) DFT und TD-DFT – 1 V (22.11.)

3. Einführung in ML-Methoden:

a) Michael Hecht (CASUS): Neural Nets - Einführung, Stärken, Schwächen - 1 V (29.11)

b) Michael Hecht und Karan Shah (CASUS): Physics informed NN, Demonstrationen, Anwendungen, 1 V (6.12.)

c) Sören Christensen (Mathematik): supervised learning, Fehler und Optimierung – 1 V (13.12.)

d) ML-Anwendungen in der Vielteilchentheorie/Chemie: Anatole v.Lilienfeld (U Toronto) – 1 V (20.12.)

Teil II: Anwendungen: Simulationen, HPC, ML

II.1 Quanten-Monte Carlo and NN-Interpolation: Tobias Dornheim (CASUS) – ½ V (10.1.)

II.2. Bridging time and length scales of plasma-surface interaction using machine learning: Jan Trieschmann (T-Fak, CAU): ½ V (10.1.)

II.3a MD + ML-Force fields with neural nets: Jörg Behler (U Göttingen) 1V (17.1.)

II.3b MD + ML-Pair potentials (regression): Aidan Thompson (Sandia NL): 1V (24.1.)

due to the time difference this seminar starts 14.15

II.4 Physics informed ML for DFT simulations: Attila Cangi (CASUS) – 1 V (31.1.)

Teil III: Studentische Vorträge*: 7.2.

**Stand 3.1. 2023,

*für Physik-Studierende an der CAU 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, in Zusammenarbeit mit CASUS Görlitz und dem Computational Science Center der CAU, insbes. Prof. Steffen Börm und Prof. Bernd Hartke

Vorbesprechung: Freitag 21.10. 14.00, Geiger-Hörsaal, sowie per zoom (s. oben)