

Abschlussarbeit

Machine-Learning-beschleunigte Materialsimulation

Machine-Learning-Methoden haben in den letzten Jahren aufgrund zahlreicher Anwendungen (z.B. im Bereich Autonomes Fahren und Texterkennung) zunehmend an Bedeutung in Forschung und Industrie gewonnen. Maschinelles Lernen beschreibt dabei das Generieren von Wissen auf Basis von Erfahrung.

Molekulardynamik-Simulationen (MD) sind ein häufig genutztes Tool, um Materialien auf der Mikroskala zu beschreiben. Da jedoch die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Atomen eines Materials berücksichtigt werden muss, sind die zu betrachtenden Systeme wegen des Rechenaufwands auf kleine Zeit- und Längenskalen begrenzt.

Die Idee dieser Abschlussarbeit ist, Machine-Learning-Methoden zu verwenden, um MD-Simulationen zu beschleunigen. Dabei soll eine gewisse Anzahl von Zeitschritten durch einen Machine-Learning-Schritt ersetzt werden. Die Genauigkeit und Effizienz dieses Verfahrens soll detailliert an einfachen Beispielen untersucht werden. Vorkenntnisse in MD-Simulationen und Machine-Learning werden nicht vorausgesetzt.

Zielgruppe: Studierende der Ingenieurwissenschaften

Voraussetzungen

- Grundlegende Programmierkenntnisse
- Basiskenntnisse in Materialphysik

Bei Interesse oder Rückfragen bitte bei Nina Gunkelmann (nina.gunkelmann@tu-clausthal.de) melden.

Besuchsanschrift:
Gebäude A1
Adolph-Roemer-Str. 2a
38678 Clausthal-Zellerfeld

Telefon: (0 53 23) 72-3166
Telefax: (0 53 23) 72-2203
info@itm.tu-clausthal.de
<http://www.itm.tu-clausthal.de>

Briefanschrift:
Postfach 12 53
38670 Clausthal-Zellerfeld

Bankverbindung:
Sparkasse
Hildesheim-Goslar-Peine
IBAN: DE7125950130000022111
Swift/BIC Code: NOLADE21HIK

Steuernummer: 21/204/50018
USt.-Ident-Nr. DE811282802