

Universität
Münster

Aktuelle Aspekte der theoretischen Chemie

<https://www.uni-muenster.de/CMTC/lehre/index.html>



CENTER FOR
MULTISCALE THEORY
AND COMPUTATION

Vorlesungen

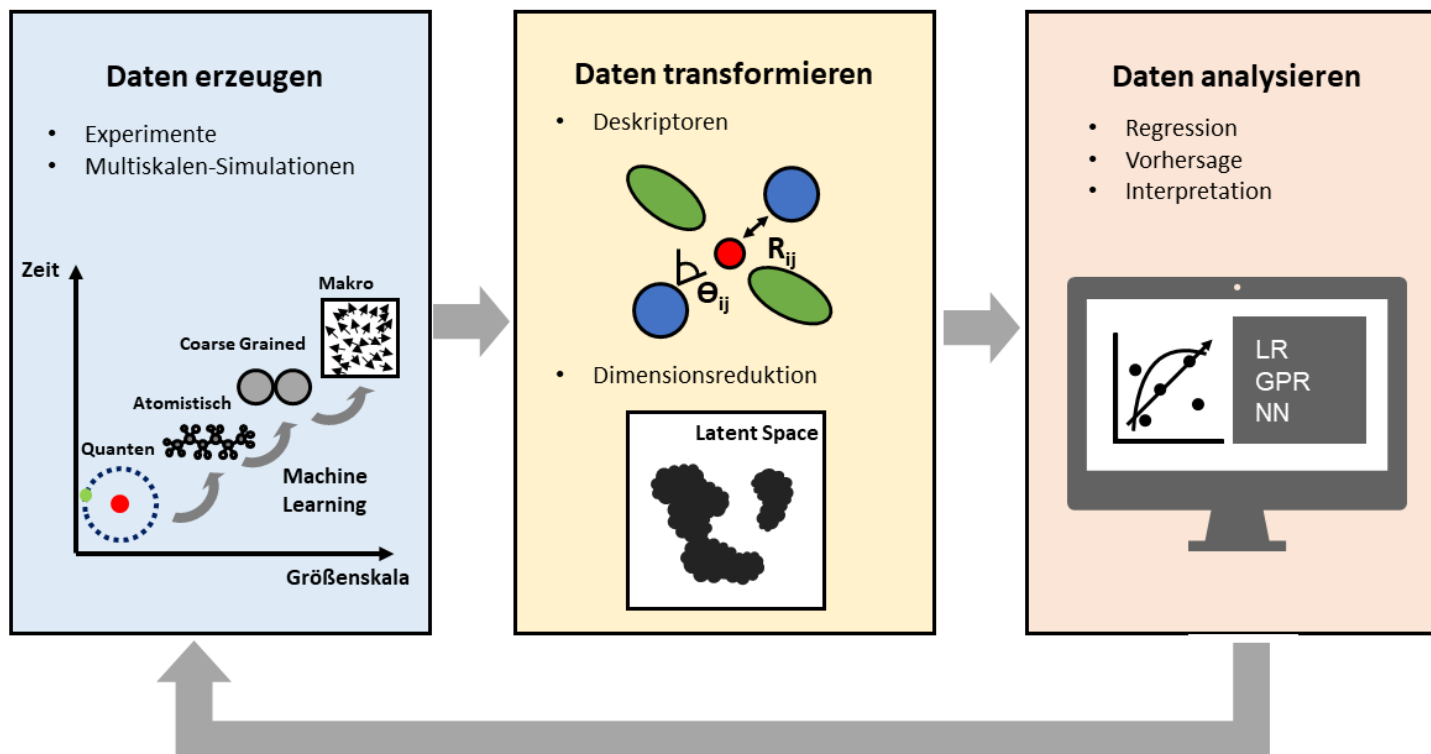
1. Eine Einführung in die künstliche Intelligenz (2SWS)
Prof. O. Koch
Freitags, 10-12 Uhr, Pharmacampus
2. Introduction to scientific computing at NWZ (2SWS)
Dr. M. Korth
3. Computational Exploration of Chemical Reaction Networks (1SWS)
Dr. Ch. Mück-Lichtenfeld
4. Excited-State Electronic-Structure Methods (1SWS)
Prof. J. Neugebauer
5. Machine Learning in der theoretischen Analyse und Simulation molekularer Systeme (3SWS)
Prof. A. Heuer, Prof. J. Neugebauer, Prof. N. Doltsinis, M. Fischer

**Vorlesungen frei wählbar:
Insgesamt 4 SWS**

Vorbesprechung (voraussichtlich):
7. Oktober, 16:15 Uhr
Raum 519 OC/BC

Voranmeldung:
j.neugebauer@uni-muenster.de

Machine Learning in der theoretischen Analyse und Simulation molekularer Systeme



- Interdisziplinäres Lehrprogramm
- Organisiert durch Center for Nonlinear Science (CeNoS)
- Von den Basics über komplexe Anwendungen hin zu theoretischen Vertiefungen
- Beteiligte: u.a. Chemie u. Pharmazie, Mathematik u. Informatik, Physik, Sportwissenschaften, Medizin

<https://www.uni-muenster.de/CeNoS/InterKIWWU/>

Vorlesungsinhalte

- Vorlesungen: Prof. Andreas Heuer, Prof. Johannes Neugebauer, Prof. Nikos Doltsinis
- Übungen in Form von Jupyter-Notebooks: Mirko Fischer
- Wöchentlich am Dienstag, 12:30-14:00 Uhr, Do: 12:30-13:15, Start: 14.10.2025, 3 SWS
- Ort: Seminarraum 519 OC/BC

Methoden

Feature
Engineering

Lineare
Regression

Aktives
Lernen

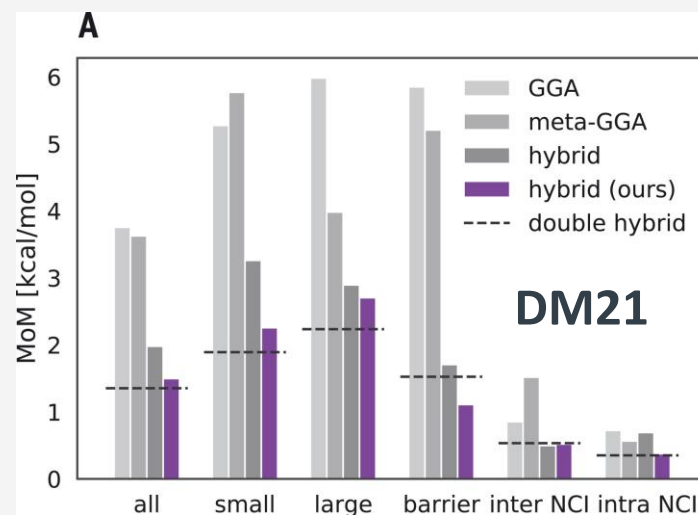


Neuronale
Netze

Symbolic
Regression

Gaussian Process
Regression

Dichtefunktionaltheorie



Molekulardynamik

