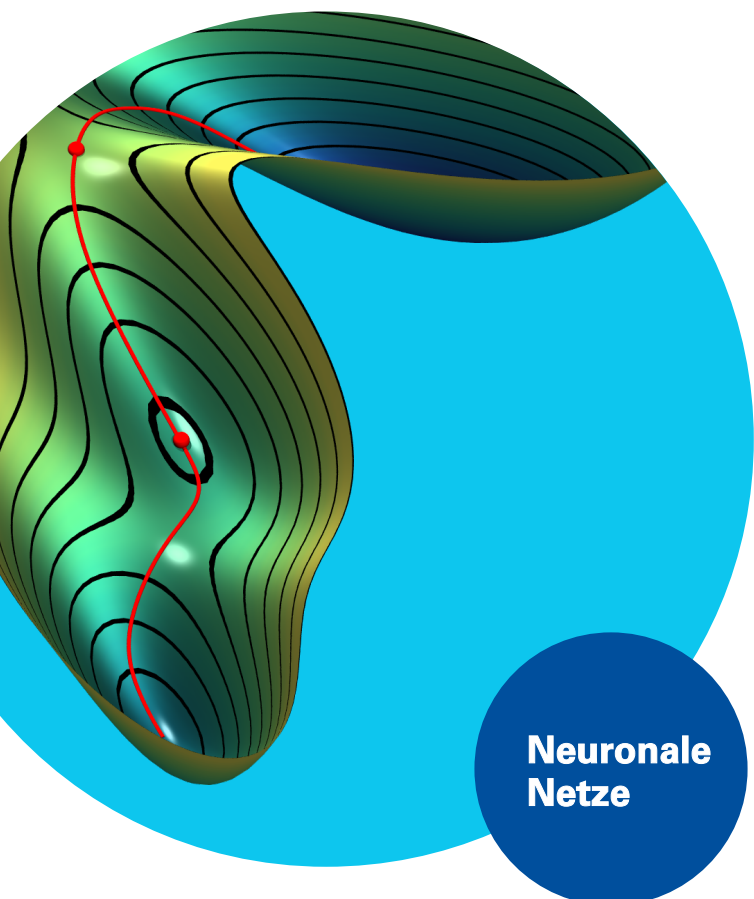


Universität Stuttgart

Institut für theoretische Chemie

April Cooper,

Prof. Dr. Johannes Kästner



**Neuronale
Netze**

FIT VON POTENTIALENERGIEFLÄCHEN MITTELS KÜNSTLICHER NEURONALER NETZE

Projektarbeit am Institut für theoretische Chemie

Um den Tunneleffekt bei chemischen Reaktionen vorherzusagen benötigt man die Energie für viele Strukturen entlang des Reaktionspfades. Der Rechenaufwand dafür kann deutlich verringert werden, wenn eine interpolierte Potentialenergiefläche zur Verfügung steht. Um eine solche zu berechnen benötigt man eine effiziente und möglichst genaue Fitmethode. Künstliche neuronale Netze eignen sich dazu hervorragend.

In unserer Arbeitsgruppe werden neuronale Netze mit dem L-BFGS- sowie dem konjugierten-Gradienten-Verfahren optimiert. Im Rahmen der Projektarbeit soll ein weiterer Optimierungsalgorithmus, der Levenberg-Marquardt-Algorithmus, implementiert und damit künstliche neuronale Netze gefittet werden. Schließlich sollen die Reaktionsraten mittels der gefitteten künstlichen neuronalen Netze bestimmt und mit Reaktionsraten, die durch andere Optimierungsalgorithmen erhalten wurden, verglichen werden. Das Projekt kann auf Wunsch zu einer Bachelorarbeit ausgebaut werden.

Kontakt:

April Cooper

Institut für theoretische Chemie

cooper@theochem.uni-stuttgart.de

[www.uni-stuttgart.de/theochem/groups/
kaestner/forschungspraktikum.html](http://www.uni-stuttgart.de/theochem/groups/kaestner/forschungspraktikum.html)

