Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar für Mitarbeiter über „Künstliche Intelligenz in der Theoretischen Chemie“

jeweils montags, 10:30 Uhr, im Seminarraum 803 (Geb. 30.44)

29.10.18 **Fabian Mack**
Tutorial: Kernel ridge regression (KRR)
- M. Rupp, *Int. J. Quantum. Chem.* **2015**, *115*, 1058.
- K. Vu et al., *Int. J. Quantum. Chem.* **2015**, *115*, 1115.

05.11.18 **Florian Rehak**
Molecular properties with KRR
- M. Rupp et al., *J. Phys. Chem. Lett.* **2015**, 6, 3309.

12.11.18 **Pascal Förster**
The Δ-machine-learning approach
- R. Ramakrishnan et al., *J. Chem. Phys.* **2015**, *143*, 084111.
- R. Ramakrishnan et al., *J. Chem. Theory Comput.* **2015**, *11*, 2087.

19.11.18 **Max Kehry**
Tutorial: Gaussian process regression (GPR)
- A.P. Bartók and G. Csányi, *Int. J. Quantum Chem.* **2015**, *115*, 1051.

26.11.18 **Marius Rabung**
Improving geometry optimizations with GPR
- G. Schmitz and O. Christiansen, *J. Chem. Phys.* **2018**, *148*, 241704.

03.12.18 **Yannick Franzke**
Predicting correlation energies using Hartree-Fock input
- M. Welborn et al., *J. Chem. Theory Comput.* **2018**, *14*, 4772.

10.12.18[a)] **Ansgar Pausch**
Tutorial: Artificial neural networks (ANN)
- J. Behler, *Int. J. Quantum Chem.* **2015**, 115, 1032.

14.01.19 **Andreas Heimermann**
ANN versus GPR for representing potential energy surfaces
- A. Kamath et al., *J. Chem. Phys.* **2018**, *148*, 241702.

21.01.19 **Timo Schulz**
Exchange-correlation potentials with ANNs
- R. Nagai et al., *J. Chem. Phys.* **2018**, *148*, 241737.

28.01.19 **Nils Schieschke**
Local descriptors for ANNs
- O.A. von Lilienfeld et al., Int. J. Quantum Chem. 2015, 115, 1084.
- O.T. Unke and M. Meuwly, *J. Chem. Phys.* **2018**, *148*, 241708.

gez. K. Fink, W. Klopper, C. van Wüllen, F. Weigend

---

a) Ausnahmsweise um 15:15 Uhr.