

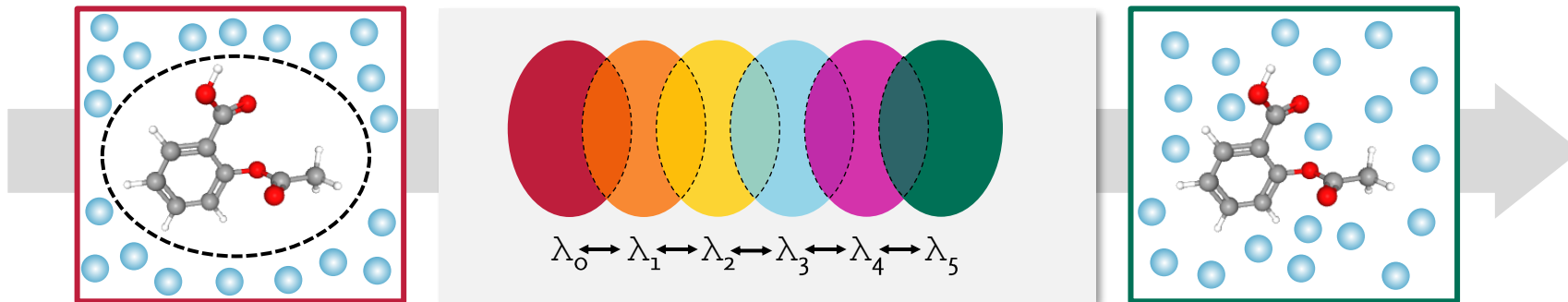
Methodische Weiterentwicklung eines Optimierungstools in Python für Löslichkeitssimulationen

Motivation

- Molekulare Löslichkeitssimulationen sind sehr rechenintensiv
- Manuelle Wahl der λ -Zustände oft überdimensioniert
- Optimierung dieses Inputparameters bietet hohes Potential in der Reduktion des Rechenaufwands

Aufgaben

- Eigenständige Durchführung von Simulationen auf Rechencluster
- Ergänzung des bestehenden Codes (Python, objektorientiert)
- Analyse des Konvergenzverhaltens
- Erweiterung der Optimierungsstrategie



Vorkenntnisse in Python wünschenswert. Der Umfang der Arbeit kann für eine **Bachelor- oder Studienarbeit** angepasst werden.