

**Technische Universität Berlin**

Bei der Technischen Universität Berlin ist/sind folgende Stelle/n zu besetzen:

Wiss. Mitarbeiter*in (d/m/w) - Entgeltgruppe 13 TV-L Berliner Hochschulen - Zur Qualifizierung

Teilzeitbeschäftigung ist ggf. möglich

Das Berlin Institute for the Foundations of Learning and Data (BIFOLD) der TU Berlin (Prof. Klaus Robert Müller) sucht für ein Agility-Teilprojekt eine*n wissenschaftliche*n Mitarbeiter*in im Bereich Maschinelles Lernen (ML). Das Agilitätsprojekt wird in den Forschungsgruppen "Maschinelles Lernen für molekulare Simulation in der Quantenchemie" (<https://www.bifold.berlin/people/dr-stefan-chmiela.html>) unter der Leitung von Dr. Stefan Chmiela und "Probabilistische Modellierung und Inferenz" (<https://web.ml.tu-berlin.de/author/dr.-shinichi-nakajima/>) unter der Leitung von Dr. Shinichi Nakajima durchgeführt.

Dr. Chmielas Team beschäftigt sich mit der Modellierung von Mehrkörpersystemen mit Anwendungen in der Quantenchemie, insbesondere für die Vorhersage von Lösungen der Schrödingergleichung. Das übergeordnete Ziel des Teams ist die Entwicklung von Modellen zur Beschleunigung von genauen Molekulardynamik-Simulationen zur Berechnung von dynamischen und thermodynamischen Observablen physikalischer Systeme.

Fakultät IV - The Berlin Institute for the Foundations of Learning and Data (BIFOLD) / FG Maschinelles Lernen (ML)

Kennziffer: IV-354/24 (besetzbar ab sofort / befristet für 3 Jahre / Bewerbungsfristende 07.11.2024)

Aufgabenbeschreibung:

Unabhängige und verantwortungsvolle Forschung auf dem Gebiet des Maschinellen Lernens. Ziel des ausgeschriebenen Projektes ist die Entwicklung neuer Erklärmethoden (Explainable Artificial Intelligence, XAI) für die atomistische Modellierung in der Quantenchemie. Der Schwerpunkt liegt auf dem Erwerb physikalisch fundierter Erkenntnisse, um Hypothesen in der Quantenchemie zu leiten.

Die damit verbundenen Aufgaben sind:

- Entwicklung und Implementierung von XAI-Methoden für ML-Modelle in der Quantenchemie
- Einbeziehung von physikalischem Wissen über die Zielsysteme in die Modelle, z.B. Unterscheidung verschiedener kurz- und langreichweitigen Wechselwirkungen zwischen Atomen
- Evaluierung der entwickelten Methoden anhand von Benchmark-Problemen und Einordnung von Beobachtungen im physikalischen Kontext
- Kommunikation der Ergebnisse durch Präsentationen
- Lehraufgaben

Erwartete Qualifikationen:

- Erfolgreich abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (Master, Diplom oder Äquivalent) in Physik, Mathematik, oder Informatik
- Nachgewiesene Erfahrung in maschinellem Lernen mit einem ausgeprägten Verständnis von Algorithmen, lineare Algebra, Funktionalanalysis und verwandten mathematischen Konzepten
- Solide Kenntnisse in Physik, einschließlich Methoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung
- Ausgezeichnete Programmierkenntnisse in Python und solide Kenntnisse gängiger Frameworks für maschinelles Lernen wie PyTorch oder TensorFlow
- Ausgeprägte Kommunikationsfähigkeiten in Englisch und die Fähigkeit, komplexe Themen einem breiten Publikum mit unterschiedlichem Hintergrund zu erklären (d.h. sowohl Informatiker*innen als auch Physiker*innen)
- Vertrautheit mit SOTA-Maschinenlernmodellen und Ansätzen für die Modellierung von molekularen Kraftfeldern mit ML
- Die Fähigkeit zum Unterrichten in deutscher und/oder in englischer Sprache wird vorausgesetzt; Bereitschaft, die jeweils fehlenden Sprachkenntnisse zu erwerben

Wünschenswert:

- Die Fähigkeit, mit einem Team von ML-Expert*innen und Physiker*innen zusammenzuarbeiten

Ihre **schriftliche** Bewerbung richten Sie bitte unter **Angabe der Kennziffer** mit den üblichen Bewerbungsunterlagen (d.h. mindestens Anschreiben, CV, Abschlusszeugnisse, Notenübersichten etc.) an die **Technische Universität Berlin - Die Präsidentin - Fakultät IV, Institut für Softwaretechnik und Theoretische Informatik, FG Maschinelles Lernen, Prof. Dr. Müller, MAR 4-1, Marchstr. 23, 10587 Berlin** oder per E-Mail (eine PDFDatei, max. 5 MB) an: jobs@bifold.berlin.

Aus Kostengründen werden postalisch zugesandte Bewerbungsunterlagen nicht zurückgesandt. Bitte reichen Sie nur Kopien ein.

Mit der Abgabe einer Onlinebewerbung geben Sie als Bewerber*in Ihr Einverständnis, dass Ihre Daten elektronisch

verarbeitet und gespeichert werden. Wir weisen darauf hin, dass bei ungeschützter Übersendung Ihrer Bewerbung auf elektronischem Wege keine Gewähr für die Sicherheit übermittelter persönlicher Daten übernommen werden kann. Datenschutzrechtliche Hinweise zur Verarbeitung Ihrer Daten gem. DSGVO finden Sie auf der Webseite der Personalabteilung: https://www.abt2-t.tu-berlin.de/menue/themen_a_z/datenschutzerklaerung.

Zur Wahrung der Chancengleichheit zwischen Frauen und Männern sind Bewerbungen von Frauen mit der jeweiligen Qualifikation ausdrücklich erwünscht. Schwerbehinderte werden bei gleicher Eignung bevorzugt berücksichtigt. Die TU Berlin schätzt die Vielfalt ihrer Mitglieder und verfolgt die Ziele der Chancengleichheit. Bewerbungen von Menschen aller Nationalitäten und mit Migrationshintergrund sind herzlich willkommen.

Die Stellenausschreibung ist auch im Internet abrufbar unter:
<https://www.personalabteilung.tu-berlin.de/menue/jobs/>

