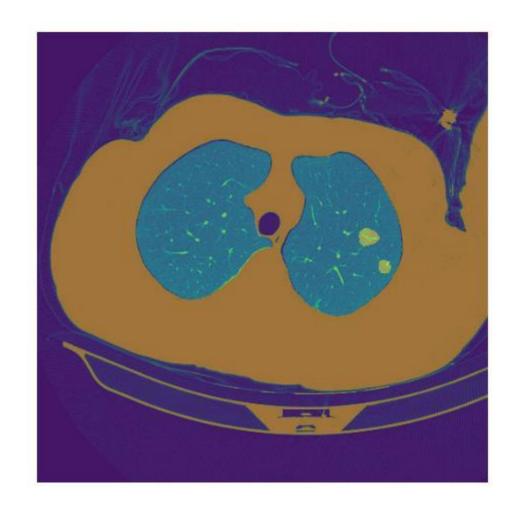
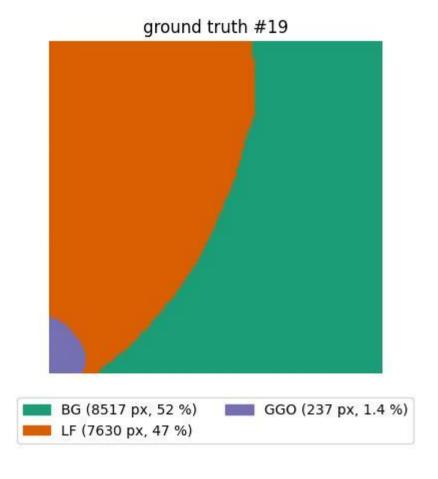
Anwendungsbeispiele für Programmierprojekte in Python

Python Workshop des WiChem Kiel e.V. am 12.01.2023

Segmentierung von Lungengewebe in CT-Scans zur Vorhersage von COVID-19 Krankheitsverläufen (Projektarbeit "Machine Learning für die Medizin" der Initiative "opencampus.sh")





Lieferroutenoptimierung durch Klassifikationsmodelle (Modul bwlResSemSerAnalytics-01a: "Forschungsseminar Service Analytics", AK Prof. Catherine Cleophas)

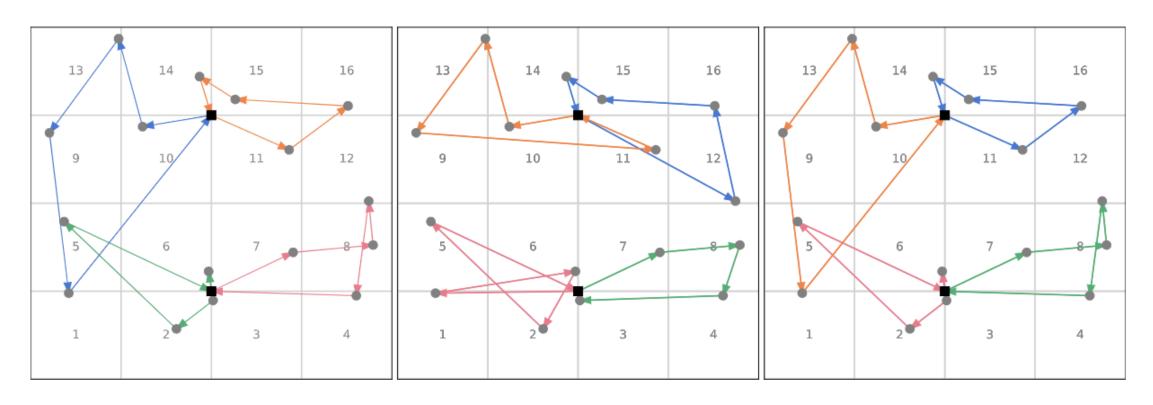
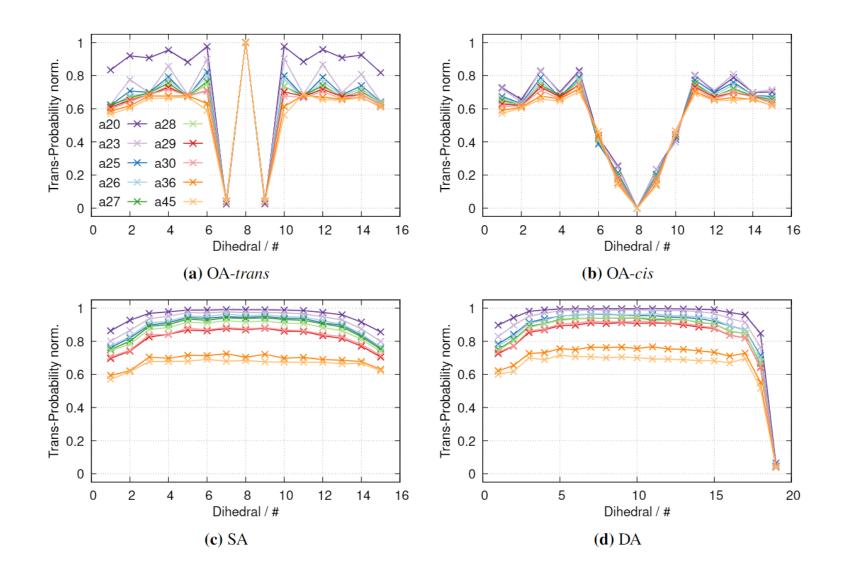


Abbildung 6: Beispiel optimaler Routenbildung durch ML-Ansatz und nicht-optimaler Routenbildung durch CD-Ansatz (optimale Lösung links, CD-Zuordnung in der Mitte und ML-Zuordnung rechts). In diesem Beispiel war die ML-Methode in der Lage, die optimale Zuordnung, die eine flexible Depotzuordnung voraussetzt, zu treffen.

Verarbeitung und Analyse großer Datenmengen (hier ~25 TB) zur Molekülsimulation (Masterarbeit theoretische Chemie, AK Prof. Bernd Hartke)



Vorhersage von Auslastungen einer Hamburger S-Bahn entlang ihrer Fahrroute (Modul bwlResSemDatenorientPlan-01a: "Forschungsseminar Datenorientierte Planung", AK Prof. Catherine Cleophas)

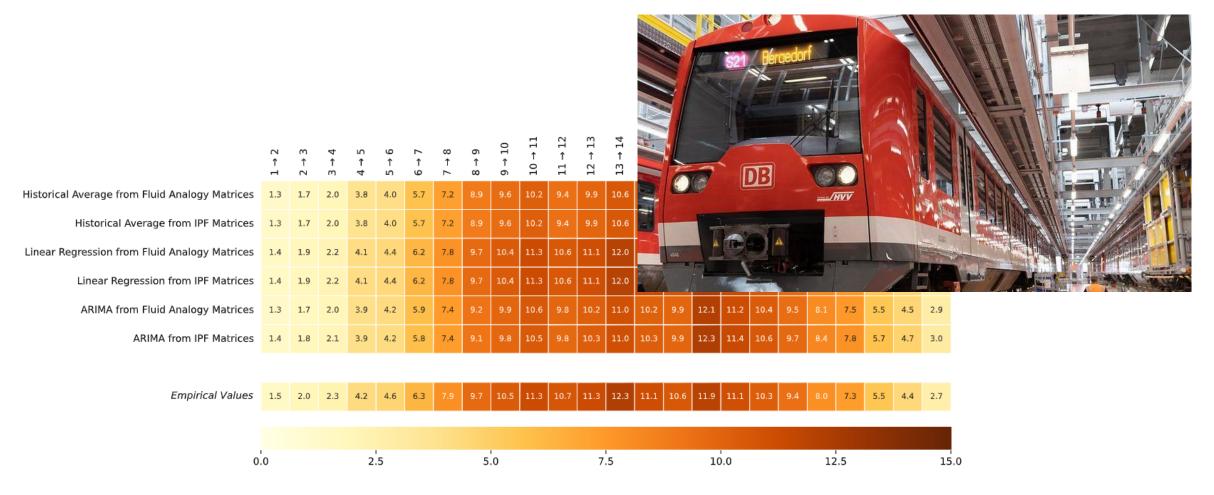


FIGURE 10: Seat congestions in 2019 in travel direction A in percent: Comparison of absolute values from the predictions with empirical values from 2019 boarding-alighting data.

Klassifikation von Peaks in Massenspektren (Projektarbeit analytische Chemie, AK Prof. Marcel Jaspars)

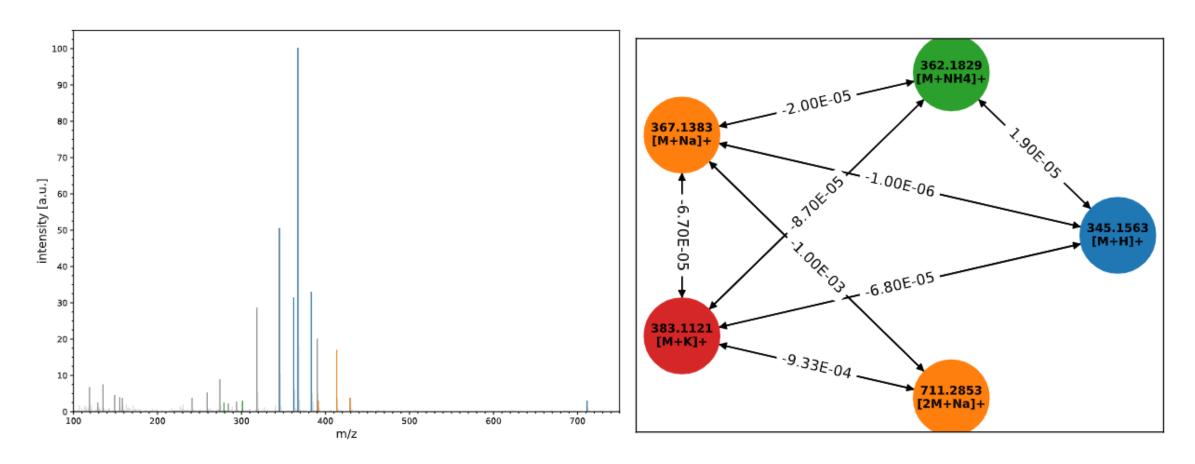
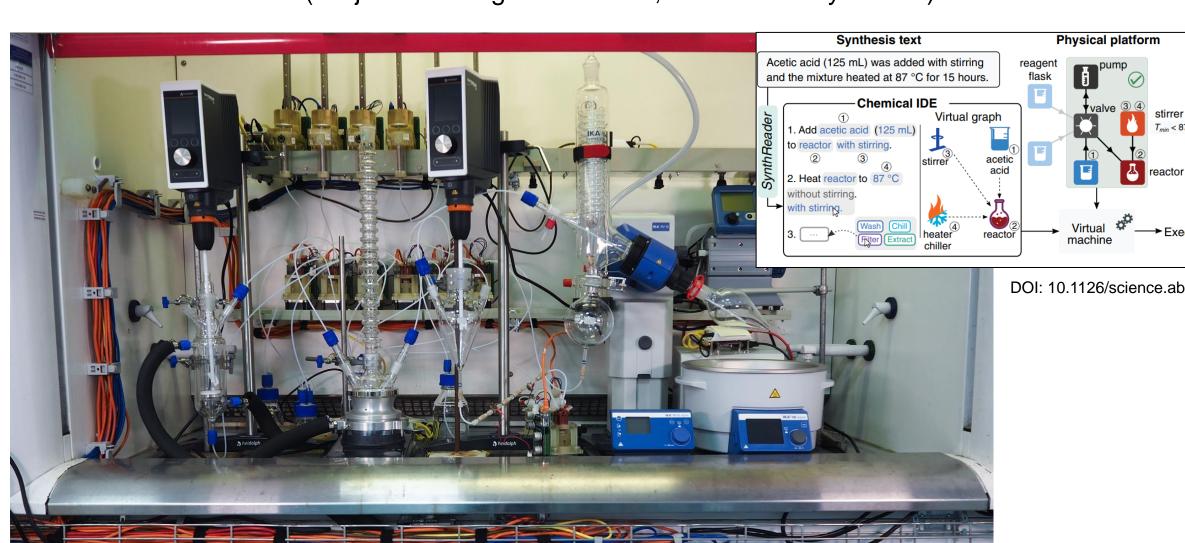


Figure 1: Adduct estimator results: exemplary color-coded MS (left) and molecular network of the MS peaks highlighted in the MS in blue (right).

Automatisierung von Syntheseprozessen im "Chemputer" (Projektarbeit digitale Chemie, AK Prof. Leroy Cronin)



DOI: 10.1126/science.abc2986

stirrer hotplate

 T_{min} < 87 °C < T_{max}

→ Executable