

Studiengang Technomathematik an der Fachhochschule Aachen / Abteilung Jülich  
Schwerpunktfach im Hauptstudium

Sommersemester 2005

## **Computersimulations-Methoden in den Naturwissenschaften: Molekulardynamik (V2 P3)**

**Dozent:** Dr. Godehard Sutmann (ZAM)

### **Inhalt der Vorlesung:**

Die Vorlesung wird als Teil einer Vorlesungsreihe über Computersimulations-Methoden angeboten. Inhalt dieses Teils wird die Einführung in Methoden der klassischen molekulardynamischen Simulation von komplexen Vielteilchensystemen sein, die häufig z.B. in der Physik, physikalischen Chemie, Biophysik, Materialwissenschaften oder der Astrophysik Anwendung findet.

- Statistische Beschreibung von komplexen Systemen
- Dynamische Beschreibung klassischer Vielteilchensysteme
- Integrationsverfahren
- Algorithmen zur Kraftberechnung
  - Kurz- und langreichweitige Potentiale
- Algorithmen für Parallelrechner
  - Prinzipien der parallelen Programmierung
  - Parallele Algorithmen zur Kraft- und Potentialberechnung

Im Praktikum sollen eigene Programme entwickelt und auf einfache Problemstellungen angewendet werden. Kenntnis einer gängigen Programmiersprache (z.B. C/C++, Fortran90) sowie Freude am Programmieren sind für das Praktikum Voraussetzung.

**Vorbesprechung:** Mo. 14.3.2005  
14 Uhr  
ZAM Besprechungsraum 2 (Zi. 146)

**Vorlesung und  
Praktikum:** als Blockkurs nach Absprache

**Ort:** Forschungszentrum Jülich  
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM)