

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

Sommersemester 2007

Computersimulations-Methoden in den Naturwissenschaften: I. Molekular Dynamik

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 die klassische Molekular Dynamik sein, eine Methode, die die Bewegung von Atomen und Molekülen auf atomistischer Skala erlaubt und die häufig in der Physik, physikalischen Chemie, Biophysik, Materialwissenschaften oder der Astrophysik Anwendung findet. Dabei werden unter anderem folgende Punkte behandelt werden:

- Statistische Beschreibung von komplexen Systemen
- Molekulardynamik Simulationen
 - Dynamische Beschreibung klassischer Vielteilchensysteme
 - Modellierung
 - Integrationsverfahren
 - Algorithmen zur Kraftberechnung
- 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 und die Übungen Voraussetzung.

Vorbesprechung: Fr. 16.3.2007
10.30 Uhr
ZAM Besprechungsraum 2 (Zi. 146)

Vorlesung: nach Absprache als Blockkurs
Praktikum: nach Absprache als Blockkurs

Ort: Forschungszentrum Jülich
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM)