

Computersimulationen in der statistischen Physik

Inhalt

1. **Einführung zur klassischen Monte Carlo-Simulationen** (~ 6 Doppelstunden)
 - Grundlagen der statistischen Mechanik
 - Theorie der Markov-Ketten
 - Einführung in die MC-Simulation: simple sampling, importance sampling
 - Autokorrelationen und Fehlerrechnung, Binning, Jackknife
 - Zufallszahlengeneratoren
 - Datenanalyse mit `awk` mit Übungen
2. **Einführung zur klassischen Molekulardynamiksimulation** (~ 4 Doppelstunden)
 - Integrationsmethoden für Differentialgleichungen
 - Verlet-Methode und varianten (“velocity verlet”, “leap frog”)
 - Methoden der Kraftberechnung, Implementationsdetails
 - symplektische Integratoren
3. **Fortgeschrittene Methoden der MC-Simulation** (~ 7 Doppelstunden)
 - Clusteralgorithmen und nicht-lokale Updates
 - MC-Simulationen von Polymeren
 - Simulationen in verschiedenen thermodynamischen Ensembles
 - multikanonische Simulationen und verallgemeinerte Ensembles
 - Replica Monte Carlo (“parallel tempering”)
 - Ungeordnete Systeme
4. **Fortgeschrittene Methoden der MD-Simulation** (~ 4 Doppelstunden)
 - langreichweitige Wechselwirkungen
 - Brownsche Dynamik
 - Studium von Beispielsystemen
 - Anwendung von Simulationspaketen (VMD, NAMD, Gromacs, ...)
5. **Weiterführende Themen** (~ 4–6 Doppelstunden)
 - Car-Parrinello-Simulationen (Thomas Kühne)
 - Optimierungsmethoden
 - Aktuelle Forschungsthemen
 - ... (your favorite topic) ...