

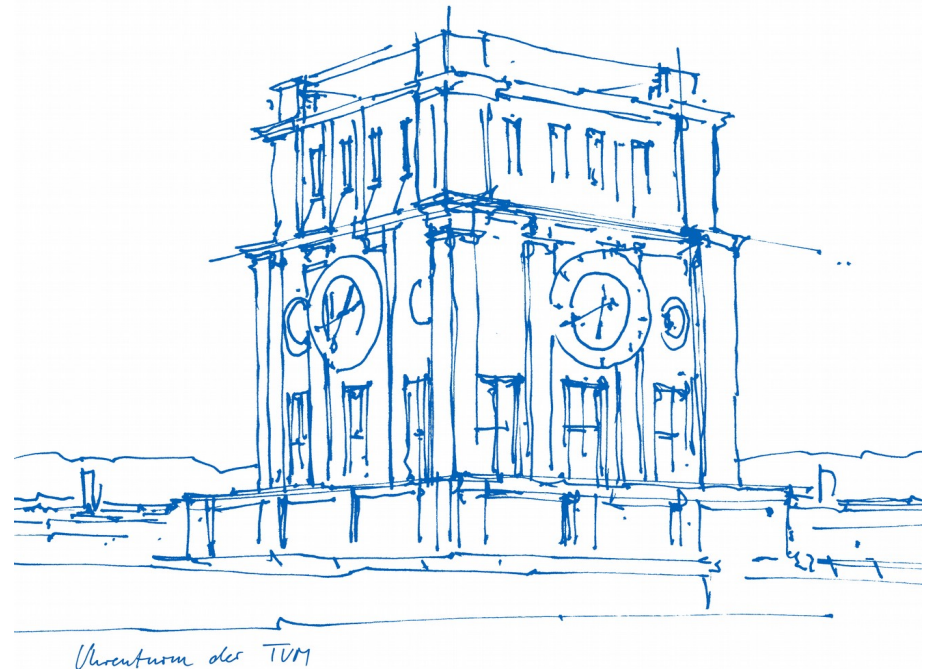
PSE Molekulardynamik

Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators in C++

Nikola Tchipev, Prof. Hans-Joachim Bungartz

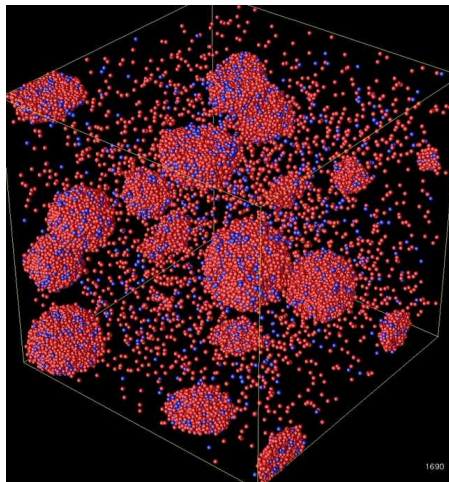
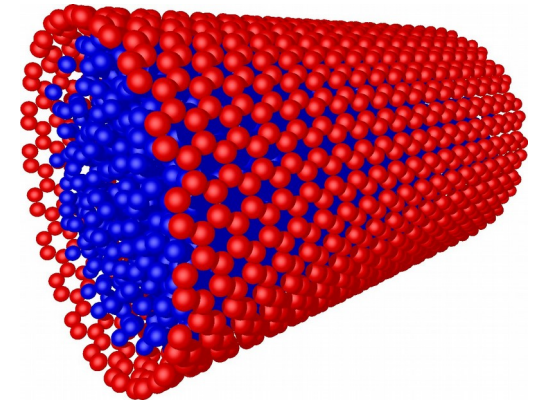
Technische Universität München

Winter Semester 2016/2017



Inhalt

- Auswahl behandelter Themen. Molekulare Simulation von Gasen, Flüssigkeiten, Festkörpern
- Umgang mit Standard-Tools zur
 - Software-Entwicklung (Git/SVN, Eclipse CDT, CppUnit, Doxygen, ...)
 - Performanz-Analyse (gprof, PAPI, Intel® VTune)
- Visualisierung
- Parallele Programmierung mit OpenMP



Organisatorisch

- Praktikum für Bachelorstudierenden
- Arbeit in 2er oder 3er Gruppen
- 5 Übungsblätter

- **Vorbesprechung: Donnerstag 30.06.16, 12:15 - 12:45, 02.07.023**
- Kontakt: Nikola Tchipev (n.tchipev@tum.de)