

## 8 Simulationsmethoden in der Physik

Module	Modulnr.	ECTS
<b>3. Semester</b>		
Theoretische Physik für Lehramt I: Mechanik/Quantenmechanik	50540	9
<b>4. Semester</b>		
Theoretische Physik für Lehramt II: Elektro- und Thermodynamik	59020	9
Physik auf dem Computer	40220	6
<b>5. Semester</b>		
Simulation Methods in Physics for SimTech I	40520	6
<b>6. Semester</b>		
Simulation Methods in Physics for SimTech II	38240	6



### Dr. Alexander Schlaich

SC SimTech

Universitätsstraße 32

[www.simtech.uni-stuttgart.de/  
exc/research/junior-research-groups/  
multiscale-materials-modeling/](http://www.simtech.uni-stuttgart.de/exc/research/junior-research-groups/multiscale-materials-modeling/)

Telefon: 685- 60132

E-Mail: [alexander.schlaich@simtech.uni-stuttgart.de](mailto:alexander.schlaich@simtech.uni-stuttgart.de)

Weitere Ansprechpartner:



### Prof. Christian Holm

Institut für Computerphysik

E-Mail: [holm@icp.uni-stuttgart.de](mailto:holm@icp.uni-stuttgart.de)



### Dr. Rudolf Weeber

Institut für Computerphysik

E-Mail: [weeber@icp.uni-stuttgart.de](mailto:weeber@icp.uni-stuttgart.de)

Einerseits werden Simulationsmethoden heutzutage standardmäßig in der Physik eingesetzt, um komplexe Probleme zu lösen, die analytisch nicht oder nur eingeschränkt zugänglich sind. Sie helfen also dabei, die theoretische Forschung voranzubringen. Andererseits können Simulationen bisweilen Experimente sehr genau reproduzieren, erlauben dabei aber meist genauere Einsicht in das System. Insbesondere können einzelne Aspekte berücksichtigt oder vernachlässigt werden. So helfen sie auch, moderne Experimente zu analysieren und zu interpretieren. Während Simulationen teils noch als Teil der theoretischen Physik gesehen werden, setzen sie sich mehr und mehr als das dritte Standbein der Physik, neben Theorie und Experiment, durch. Unabhängig davon spielen Simulationsmethoden in der gesamten Physik eine zunehmend wichtige Rolle.

Physikalische Systeme, die mit Hilfe von Computersimulationen untersucht werden, sind unter anderem Flüssigkeiten, viskoelastische Materialien wie Gummi, Polymere, Kolloide, biologische Materialien wie Zellmembranen oder DNA-Moleküle, Halbleiter oder Metalle. Auch die Bewegungen ganzer Galaxien werden simuliert, um die Gültigkeit von astrophysikalischen Modellen zu untersuchen.

Das Modul „Physik auf dem Computer“ gibt eine Einführung in die Grundlagen der numerischen Mathematik, die das mathematische Fundament für alle Simulationsmethoden in Physik und Chemie bildet.

Mit diesen Grundlagen an der Hand können wir nun in die zentrale Veranstaltung einsteigen, die „Simulationsmethoden in der Physik“. Diese besteht aus zwei Modulen und deckt die meisten der aktuellen Simulationsmethoden, von Hartree-Fock-Theorie über maschinell erlernte Wechselwirkungspotentiale bis Molekulardynamik ab. In den Übungen lernen die Teilnehmenden, diese Methoden konkret zu implementieren und auf klassische Probleme anzuwenden.

Für SimTech-Studierende, die an der Physik interessiert sind, gibt es jeweils in den Semesterferien ein Treffen mit den anderen Interessierten am Institut für Computerphysik, bei der die zahlreichen, individuellen Möglichkeiten in der Physik besprochen werden. Wer an diesen Treffen teilnehmen möchte, melde sich bitte per E-mail bei Alexander Schlaich ([alexander.schlaich@simtech.uni-stuttgart.de](mailto:alexander.schlaich@simtech.uni-stuttgart.de)).

### **Weiterführung im Master-Studiengang**

Für den Wahlbereich im Master wird empfohlen, individuell Module aus dem Wahlbereich des Masters Physik zu wählen nach Absprache mit dem Advisor. Hierbei ist zu beachten, dass viele Lehrveranstaltungen aus dem Wahlbereich der Physik nur unregelmäßig angeboten werden

Besonders hingewiesen werden soll aber auf die einwöchige „ESPResSo Summer School“ (erster Teil des Moduls 56070 „Simulation Methods in Physics for SimTech III). Hier wird in der Woche vor Beginn des Wintersemesters die Open-Source-Simulationssoftware ESPResSo im Detail vorgestellt.

Wie in vielen Bereichen ist auch in der Physik die Simulationstechnologie so komplex, dass es unmöglich ist, für jedes Problem ein eigenes, hinreichend effizientes Programm zu entwickeln. Stattdessen kommen Programmpakete zum Einsatz. Der Hauptanwendungsbereich von ESPResSo liegt in der Simulation weicher Materie, also Polymeren, kolloidalen Suspensionen oder auch biologischer molekularer Systeme. Generell spielen Molekulardynamiksimulationen bei Systemen aus Nano- und Biotechnologieforschung eine wichtige Rolle. Die physikalischen Grundlagen dazu werden in den Modulen 28610 „Physik der Flüssigkeiten“, 28620 „Stochastic Dynamics“ oder 41380 „Physics of Soft and Biological Matter“ behandelt. Einen Einblick in moderne Einsatzgebiete von Computersimulationen erlaubt der zweite Teil des Moduls 56070 „Simulation Methods in Physics for SimTech III“.