Partikelsimulation

Oliver Heidmann & Benjamin Warnke

Arbeitsbereich Wissenschaftliches Rechnen Fachbereich Informatik Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften Universität Hamburg

2017-02-09





Gliederung (Agenda)

1 Einleitung

Gliederung (Agenda)

1 Einleitung

Ziele

- Partikel-Simulation f
 ür kurzreichweitige Interaktionen
- optimiert & parallelisiert
- erweiterbar
- Cpp
- Auto-Tuning
- periodische Ränder

Gliederung (Agenda)

1 Einleitung

- M-Griebel, S. Knapek, G. Zumbuschm, A. Caglar: Numerische Simulation in der Moleküldynamic. Springer, 2003
- D.C Rapaport: The Art of Molecular Dynamics Simulation -2nd edition, Cambridge University Press, 2004