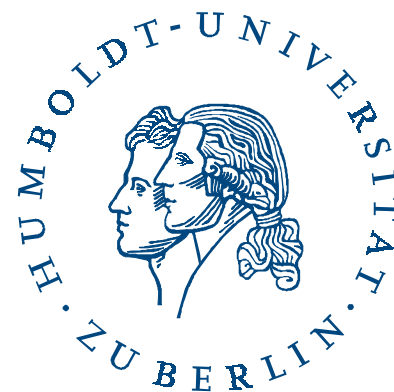


Computeranwendung in der Chemie

Informatik für Chemiker(innen)

Dr. Jens Döbler
Arbeitsgruppe Quantenchemie
Institut für Chemie
jd@chemie.hu-berlin.de



Gliederung

- Einführung
- Hardware
- Betriebssystem/Software
- Netze
- Internet
- Dateien/Daten/Organisation von Informationen
- Algorithmen

Gliederung

- Grundlagen der Programmierung
- Darstellung chemischer Strukturen
- Innere Koordinaten/Kraftfelder
- Quantenchemische Methoden
- Potentialflächen/Strukturoptimierung

Einführung

Computeranwendungen in der Chemie:

- Meßdaten/Experiment
 - Erfassung, Speicherung
 - Auswertung und Analyse (z. B. FFT)
- Datenbanken (Literatur, Strukturen, Spektren, Reaktivitäten, etc.)
- Molecular Modelling/Computational Chemistry
- Verfahrenstechnik (Prozeßsimulation, Reaktorsimulation, Strömungsdynamik, etc.)

Leistungssteigerung

Moore's law (1965): Die Anzahl von Transistoren in integrierten Schaltungen verdoppelt sich alle 12-24 Monate.

- Rechengeschwindigkeit
 - höhere Taktraten
 - neue Architekturen
 - Registerbreite (8-16-32-64 Bit)
 - Superskalares Design (parallele Funktionseinheiten)
 - parallele Verarbeitung
- Speicher

Rechengeschwindigkeit

Problem: Messung von Leistungsfähigkeit, keine einheitliche Definition, viele Parameter

Theoretische Spitzenleistung:

Takt * Anzahl Operationen pro Takt

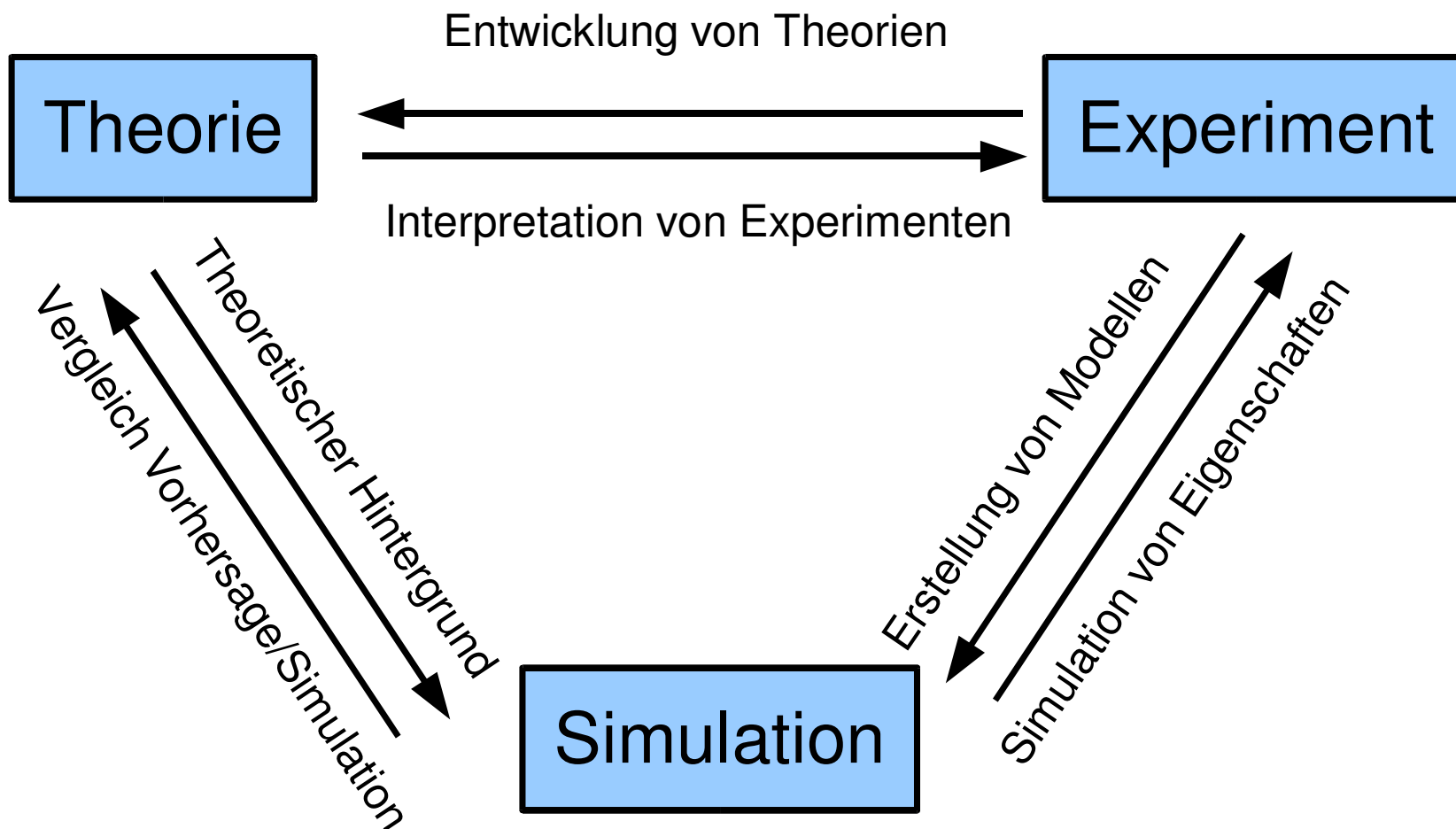
Reale Tests mit Programmen ("Benchmark"):

Aussagefähig nur für untersuchtes Programm

- Linpack (lineare Gleichungen, Parallelberechnung, für Großrechner)
- SPEC CPU2000 (für CPU, getrennt nach Integer- und Gleitkommaleistung)

Rechengeschwindigkeit

Jahr	Großrechner Top500 (Summe in TFlop)	SPECfp2000	
		Workstation	PC
2003	375	2100 (Itanium 2, 1.5)	1290 (P4, 3.0)
2002	222	1200 (Power 4, 1.3)	780 (Athlon XP 2800+)
2001	109	560 (Alpha, 1.0)	410 (PIII, 0.86)
2000	64	417 (PA-8600, 0.55)	311 (Athlon, 1.2)



Praktikumsplan

Woche	Thema
1	Anmeldung
2-3	Einführung in Unix
4-5	Einführung in HTML, Chemie im WWW
6-8	Einführung in die Programmierung in C
9-11	MATHEMATICA – Darstellung und Lösung mathematischer Probleme
12-14	HYPERCHEM – Molecular Modelling
15	Übungstermin zur Klausurvorbereitung
16	Klausur

Praktikum „Informatik für Chemiker“

Voraussetzung zur Teilnahme:

persönliches Nutzerkennzeichen im RZ (CMS) der HUB

online-Antrag:

<https://www.hu-berlin.de/cms/antrag/>
(z.B. an den Terminals im CMS)

dabei u.a. anzugeben:

- Matrikelnummer
- Dienstleistungsnummer (siehe Studienbuchseite)
- Zugehörigkeit: Institut für Chemie (wichtig!!!)

Nutzerberatung im CMS (Erwin-Schrödinger-Zentrum):

- Tel.: 2093 2163
- Raum 2'117