

**Studien- und Prüfungsordnung für den  
gemeinsamen Masterstudiengang Computational  
Sciences des Fachbereichs Biologie, Chemie,  
Pharmazie, des Fachbereichs Geowissenschaften,  
des Fachbereichs Mathematik und Informatik  
und des Fachbereichs Physik der  
Freien Universität Berlin**

**Präambel**

Aufgrund von § 14 Abs. 1 Nr. 2 Teilgrundordnung (Erprobungsmodell) der Freien Universität Berlin vom 27. Oktober 1998 (FU-Mitteilungen 24/1998) hat die Gemeinsame Kommission für den gemeinsamen Masterstudiengang Computational Sciences des Fachbereichs Biologie, Chemie, Pharmazie, des Fachbereichs Geowissenschaften, des Fachbereichs Mathematik und Informatik und des Fachbereichs Physik der Freien Universität Berlin am 21. Januar 2016 die folgende Studien- und Prüfungsordnung für den gemeinsamen Masterstudiengang Computational Sciences des Fachbereichs Biologie, Chemie, Pharmazie, des Fachbereichs Geowissenschaften, des Fachbereichs Mathematik und Informatik und des Fachbereichs Physik der Freien Universität Berlin erlassen:\*

**Inhaltsverzeichnis**

- § 1 Geltungsbereich
- § 2 Qualifikationsziele
- § 3 Studieninhalte
- § 4 Studienberatung und Studienfachberatung
- § 5 Prüfungsausschuss
- § 6 Regelstudienzeit
- § 7 Aufbau und Gliederung; Umfang der Leistungen
- § 8 Lehr- und Lernformen
- § 9 Masterarbeit
- § 10 Wiederholung von Prüfungsleistungen
- § 11 Elektronische Prüfungsleistungen
- § 12 Auslandsstudium
- § 13 Studienabschluss
- § 14 Inkrafttreten

**Anlagen**

- Anlage 1: Modulbeschreibungen
- Anlage 2: Exemplarischer Studienverlaufsplan
- Anlage 3: Zeugnis (Muster)
- Anlage 4: Urkunde (Muster)

\* Diese Ordnung ist vom Präsidium der Freien Universität Berlin am 9. Februar 2016 bestätigt worden.

**§ 1  
Geltungsbereich**

(1) Diese Ordnung regelt Ziele, Inhalt und Aufbau des gemeinsamen Masterstudiengangs Computational Sciences des Fachbereichs Biologie, Chemie, Pharmazie, des Fachbereichs Geowissenschaften, des Fachbereichs Mathematik und Informatik und des Fachbereichs Physik der Freien Universität Berlin (Masterstudiengang) und in Ergänzung zur Rahmenstudien- und prüfungsordnung der Freien Universität Berlin (RSPO) Anforderungen und Verfahren für die Erbringung von Studien- und Prüfungsleistungen (Leistungen) im Masterstudiengang.

(2) Es handelt sich um einen konsekutiven Masterstudiengang gemäß § 23 Abs. 3 Nr. 1 Buchst. a) des Gesetzes über die Hochschulen im Land Berlin (Berliner Hochschulgesetz – BerlHG) vom 26. Juli 2011 (GVBl. S. 378), der forschungsorientiert aufgebaut ist.

**§ 2  
Qualifikationsziele**

(1) Die Absolventinnen und Absolventen des Masterstudiengangs verfügen über ein breites Spektrum von Begriffen, Strukturen, Techniken und Verfahren der modernen computergestützten Naturwissenschaften. Sie haben die Fähigkeit, auch komplexe anwendungswissenschaftliche Sachverhalte in selbstständiger wissenschaftlicher Arbeit mathematisch zu formalisieren, die sich ergebenden mathematischen Problemstellungen zu strukturieren und für die computergestützte Lösung aufzubereiten, geeignete Lösungsverfahren auszuwählen und zum Einsatz zu bringen oder selbstständig zu implementieren und ihre so gewonnenen Erkenntnisse in Vorträgen oder Texten zu vermitteln.

(2) Absolventinnen und Absolventen verfügen über Fertigkeiten in wissenschaftlicher Recherche, im Lesen und Verfassen englischsprachiger, wissenschaftlicher Texte, in Vortragstechnik und Präsentation. Sie haben ein modernes Gender- und Diversitätsverständnis sowie Team-, Kommunikations- und Transferfähigkeiten.

(3) Durch ihre generelle Fähigkeit, in komplexen Problemen abstrakte Zusammenhänge zu erkennen und zur Lösung anwendungswissenschaftliche und mathematische Begriffe und Strukturen zusammenzuführen und zur Problemlösung zu nutzen, sind Absolventinnen und Absolventen des Masterstudiengangs nicht auf ein festes Berufsbild eingeschränkt. Mögliche Tätigkeitsfelder finden sich in vielen Bereichen von Wirtschaft, Wissenschaft, Verwaltung und Industrie.

**§ 3  
Studieninhalte**

(1) Der Masterstudiengang vermittelt grundlegende und aufbauende Begriffe, Strukturen, Methoden und Verfahren in einem breiten Spektrum struktur- und anwen-

dungswissenschaftlicher Wissensgebiete in Verbindung mit ergänzenden Lehrangeboten. Er gewährleistet Spezialisierungsmöglichkeiten in der aktuellen Forschung und fördert die Entwicklung von selbstständigem, wissenschaftlichem Denken mit besonderem Gewicht auf computergestützter Wissensgewinnung.

(2) Die Aneignung und Vertiefung von Fachkompetenz in der Kombination mathematisch-informatischer und anwendungswissenschaftlicher Expertise geht einher mit der systematischen Entwicklung überfachlicher Fähigkeiten sowie Schlüsselqualifikationen. Anhand von Vorträgen und Berichten lernen die Studenten, diese Expertise und Qualifikationen schriftlich oder mündlich in fachlich angemessener Form adressatenbezogen zu vertreten. In Praktikums- und Übungsgruppen und bei der Betreuung von Tutorien lernen sie, mit Gender- und Diversityaspekten umzugehen. Bei der Mitarbeit in den in der Regel international zusammengesetzten Forschungsgruppen der beteiligten Fachbereiche lernen die Studentinnen und Studenten zum Beispiel, kulturelle Unterschiede zu berücksichtigen.

### § 4

#### Studienberatung und Studienfachberatung

(1) Die allgemeine Studienberatung wird von der Zentraleinrichtung Studienberatung und Psychologische Beratung der Freien Universität Berlin durchgeführt.

(2) Die Studienfachberatung wird durch die Professorinnen und Professoren, die Lehrveranstaltungen im Masterstudiengang anbieten, zu den regelmäßigen Sprechstunden durchgeführt.

(3) Ein Beratungsgespräch mit der oder dem Vorsitzenden der Prüfungskommission oder ihrer Stellvertreterin oder ihrem Stellvertreter innerhalb der ersten zwei Wochen des 1. Fachsemesters wird dringend empfohlen. Die individuelle Studiengangsplanung, insbesondere die Planung des Synchronisierungsbereichs, des Bereichs Scientific Computing und die Ausrichtung des Spezialisierungsbereichs sollen beraten werden. Dazu werden ausreichend Termine angeboten und in geeigneter Form rechtzeitig bekannt gegeben.

### § 5

#### Prüfungsausschuss

Zuständig für die Organisation der Prüfungen und die übrigen in der RSPO genannten Aufgaben ist der von der Gemeinsamen Kommission für den gemeinsamen Masterstudiengang Computational Sciences des Fachbereichs Biologie, Chemie, Pharmazie, des Fachbereichs Geowissenschaften, des Fachbereichs Mathematik und Informatik und des Fachbereichs Physik der Freien Universität Berlin für den Masterstudiengang eingesetzte Prüfungsausschuss.

### § 6

#### Regelstudienzeit

Die Regelstudienzeit beträgt vier Semester.

### § 7

#### Aufbau und Gliederung; Umfang der Leistungen

(1) Im Masterstudiengang sind insgesamt Leistungen im Umfang von 120 Leistungspunkten (LP) nachzuweisen. Der Masterstudiengang gliedert sich in:

1. Synchronisierungsbereich im Umfang von 30 LP,
2. Bereich Scientific Computing im Umfang von 30 LP,
3. Spezialisierungsbereich im Umfang von 30 LP und
4. die Masterarbeit mit begleitendem Kolloquium im Umfang von 30 LP.

(2) Der Synchronisierungsbereich im Umfang von 30 LP dient der jeweilig fachlichen Ergänzung der Kompetenzprofile der Studentinnen und Studenten mit unterschiedlichem Zugang. Der Synchronisierungsbereich enthält folgende fachliche Angebote:

#### a) Chemie

- Modul: Einführung in die Molekülspektroskopie (5 LP)
- Modul: Einführung in die Theoretische Chemie (5 LP)
- Modul: Quantenmechanische Beschreibung von Atomen und chemischer Bindung (10 LP)

#### b) Geographische Wissenschaften

- Modul: Grundlagen der Fernerkundung und digitalen Bildverarbeitung (5 LP)
- Modul: Grundlagen der Hydro- und Klimageographie (5 LP)
- Modul: Grundlagen von geographischen Informationssystemen (5 LP)

#### c) Geologische Wissenschaften

- Modul: Synchronisierung Erde (10 LP)

#### d) Informatik

- Modul: Complex Algorithms A (15 LP)
- Modul: Computer Science and Data Structures A (15 LP)
- Modul: Computer Science and Functional Programming A (15 LP)
- Modul: Computer Science and Object-Oriented Programming A (15 LP)

#### e) Mathematik

- Modul: Introduction to Mathematical Numerics A (15 LP)
- Modul: Numerics of ODEs and numerical linear algebra A (15 LP)

- Modul: Numerics of partial differential equations A (15 LP)
  - Modul: Synchronisierung Mathematik (15 LP)
- f) Meteorologie
- Modul: Dynamik der Atmosphäre (8 LP)
  - Modul: Einführung in die Dynamik der Atmosphäre (7 LP)
  - Modul: Grundlagen der Synoptischen Meteorologie (7 LP)
- g) Physik
- Modul: Computational Statistical Physics I A (15 LP)
  - Modul: Computational Statistical Physics II A (15 LP)
  - Modul: Einführung in die Quantenmechanik (10 LP)

Im Synchronisierungsbereich ist das Modul „Computational Sciences“ (15 LP) verpflichtend zu absolvieren. Zudem sind Module im Umfang von insgesamt 15 LP entsprechend den jeweiligen Vorkenntnisse wie folgt zu absolvieren:

1. Studentinnen und Studenten mit einem Abschluss in einem Bachelorstudiengang Chemie, Geographische Wissenschaften oder Geologische Wissenschaften mit der Modulsequenz Naturwissenschaftliches Grundwissen mit chemisch-biologischer Betonung absolvieren folgendes Modul:
  - Modul: Synchronisierung Mathematik (15 LP).
2. Studentinnen und Studenten mit einem Abschluss in einem Bachelorstudiengang Mathematik, Informatik oder Ingenieurwissenschaften müssen Module im Gesamtumfang von 15 LP aus den folgenden fachlichen Angeboten, die oben in Satz 2 konkretisiert werden, wählen und absolvieren:
  - Chemie
  - Geographische Wissenschaften
  - Geologische Wissenschaften
  - Meteorologie
  - Physik.
3. Studentinnen und Studenten mit einem Abschluss in einem Bachelorstudiengang Physik müssen Module im Gesamtumfang von 15 LP aus den folgenden fachlichen Angeboten, die oben in Satz 2 konkretisiert werden, wählen und absolvieren:
  - Geographische Wissenschaften
  - Geologische Wissenschaften
  - Informatik
  - Mathematik
  - Meteorologie.
4. Studentinnen und Studenten mit einem Abschluss in einem Bachelorstudiengang Meteorologie müssen Module im Gesamtumfang von 15 LP aus den folgen-

den fachlichen Angeboten, die oben in Satz 2 konkretisiert werden, wählen und absolvieren:

- Chemie
  - Geographische Wissenschaften
  - Geologische Wissenschaften
  - Informatik
  - Mathematik
  - Physik.
5. Studentinnen und Studenten mit einem Abschluss in einem Bachelorstudiengang Geologische Wissenschaften mit der Modulsequenz Naturwissenschaftliches Grundwissen mit mathematisch-physikalischer Betonung müssen Module im Gesamtumfang von 15 LP aus den folgenden fachlichen Angeboten, die oben in Satz 2 konkretisiert werden, wählen und absolvieren:
- Chemie
  - Informatik
  - Mathematik
  - Meteorologie
  - Physik.
- (3) Im Bereich Scientific Computing sind zwei Module im Umfang von insgesamt 30 LP zu wählen und zu absolvieren. Eines der Module ist in der Variante A, das andere in der Variante B zu wählen. Es darf nicht dasselbe Modul in der Variante A und B gewählt werden.
1. In der Informatik werden folgende Module angeboten:
    - Modul: Complex Algorithms A (15 LP) oder Modul: Complex Algorithms B (15 LP),
    - Modul: Computer Science and Data Structures A (15 LP) oder Modul: Computer Science and Data Structures B (15 LP),
    - Modul: Computer Science and Functional Programming A (15 LP) oder Modul: Computer Science and Functional Programming B (15 LP),
    - Modul: Computer Science and Object-Oriented Programming A (15 LP) oder Modul: Computer Science and Object-Oriented Programming B (15 LP).
  2. In der Numerik werden folgende Module angeboten:
    - Modul: Introduction to Mathematical Numerics A (15 LP) oder Modul: Introduction to Mathematical Numerics B (15 LP),
    - Modul: Numerics of ODEs and numerical linear algebra A (15 LP) oder Modul: Numerics of ODEs and numerical linear algebra B (15 LP),
    - Modul: Numerics of partial differential equations A (15 LP) oder

Modul: Numerics of partial differential equations B (15 LP).

3. In der Statistik werden folgende Module angeboten:

- Modul: Computational Statistical Physics I A (15 LP) oder  
Modul: Computational Statistical Physics I B (15 LP),
- Modul: Computational Statistical Physics II A (15 LP) oder  
Modul: Computational Statistical Physics II B (15 LP).

(4) Für die Wahl des Spezialisierungsbereichs werden drei verschiedene Bereiche im Umfang von 30 LP angeboten: Molecular Sciences, Geosciences und Atmospheric Sciences. Hiervon ist ein Spezialisierungsbereich bis zu Beginn des 2. Fachsemesters zu wählen und beim Prüfungsausschuss anzumelden. Insgesamt kann nur ein Modul Forschungsprojekt (A bis E) gewählt werden. Die Absolvierung von Modulen aus anderen Masterstudiengängen der Freien Universität Berlin oder anderer Hochschulen kann nach Antrag beim Prüfungsausschuss im Einzelfall für den Spezialisierungsbereich gestattet werden, sofern die Studentinnen und Studenten einen Zugang zu diesen Modulen erhalten. Die Wahl von Modulen verschiedener Spezialisierungsrichtungen ist nicht möglich.

1. Spezialisierungsbereich Molecular Sciences:

- a) Pflichtteil: Folgende Module im Umfang von insgesamt 10 LP sind zu absolvieren:
  - Modul: Molecular Simulation I (5 LP) und
  - Modul: Quantenchemie (5 LP).
- b) Wahlpflichtteil: Aus den folgenden Modulen sind Module im Umfang von insgesamt 20 LP zu wählen und zu absolvieren:
  - Modul: Dichtefunktionaltheorie (5 LP),
  - Modul: Forschungsprojekt A (5 LP) oder  
Modul: Forschungsprojekt E (10 LP),
  - Modul: Forschungsseminar computational sciences (5 LP),
  - Modul: Markov Modeling (5 LP),
  - Modul: Molecular Simulation II (5 LP),
  - Modul: Quantenchemische Korrelationsmethoden (5 LP),
  - Modul: Quantenreaktionsdynamik (5 LP),
  - Modul: Selected topics in applied computational sciences (5 LP) und/oder
  - Modul: Selected topics in theoretical computational sciences (5 LP).

Für die Module „Quantenchemie“ (5 LP), „Dichtefunktionaltheorie“ (5 LP), „Quantenchemische Korrelationsmethoden“ (5 LP) und „Quantenreaktionsdynamik“ (5 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Mas-

terstudiengang Chemie des Fachbereichs Biologie, Chemie, Pharmazie der Freien Universität Berlin verwiesen.

2. Spezialisierungsbereich Geosciences:

- a) Pflichtteil: Folgende Module im Umfang von insgesamt 12 LP sind zu absolvieren:
  - Modul: Physik der Erde I (6 LP) und
  - Modul: Seismik II (6 LP).
- b) Wahlpflichtteil: Aus den folgenden Modulen sind Module im Umfang von insgesamt 18 LP zu wählen und zu absolvieren:
  - Modul: Dynamik der Erde (6 LP),
  - Modul: Forschungsprojekt A (5 LP) oder  
Modul: Forschungsprojekt C (7 LP),
  - Modul: Forschungsseminar computational sciences (5 LP),
  - Modul: Physik der Erde II (6 LP),
  - Modul: Selected topics in applied computational sciences (5 LP),
  - Modul: Selected topics in theoretical computational sciences (5 LP) und/oder
  - Modul: Thermodynamik und Kinetik von geologischen Prozessen (6 LP).

Für die Module „Physik der Erde I“ (6 LP), „Seismik II“ (6 LP), „Dynamik der Erde“ (6 LP), „Physik der Erde II“ (6 LP) und „Thermodynamik und Kinetik von geologischen Prozessen“ (6 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Geologische Wissenschaften des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität verwiesen.

3. Spezialisierungsbereich Atmospheric Sciences:

- a) Pflichtteil: Folgendes Modul im Umfang von 8 LP ist zu absolvieren:
  - Modul: Wetter- und Klimadiagnose (8 LP).
- b) Wahlpflichtteil: Aus den folgenden Modulen sind Module im Umfang von insgesamt 22 LP zu wählen und zu absolvieren:
  - Modul: Forschungsprojekt B (6 LP) oder  
Modul: Forschungsprojekt D (9 LP),
  - Modul: Forschungsseminar computational sciences (5 LP),
  - Modul: Klimavariabilität und -modelle (8 LP),
  - Modul: Modelle für Wetter und Umwelt (8 LP),
  - Modul: Satellitenmeteorologie (8 LP),
  - Modul: Selected topics in applied computational sciences (5 LP),
  - Modul: Selected topics in theoretical computational sciences (5 LP),
  - Modul: Theoretische Meteorologie I (8 LP) und/oder
  - Modul: Theoretische Meteorologie II (8 LP).

Für die Module „Wetter- und Klimadiagnose“ (8 LP), „Klimavariabilität und -modelle“ (8 LP), „Modelle für Wetter und Umwelt“ (8 LP), „Satellitenmeteorologie“ (8 LP), „Theoretische Meteorologie I“ (8 LP) und „Theoretische Meteorologie II“ (8 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Meteorologie des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität verwiesen.

(5) Über die Zugangsvoraussetzungen, die Inhalte und Qualifikationsziele, die Lehr- und Lernformen, den zeitlichen Arbeitsaufwand, die Formen der aktiven Teilnahme, die zu erbringenden studienbegleitenden Prüfungsleistungen, die Angaben über die Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme an den Lehr- und Lernformen, die den Modulen jeweils zugeordneten Leistungspunkte, die Regeldauer und die Angebotshäufigkeit informieren für die Module des Masterstudiengangs die Modulbeschreibungen in der Anlage 1.

(6) Über den empfohlenen Verlauf des Studiums im Masterstudiengang unterrichten die exemplarischen Studienverlaufspläne in Anlage 2.

(7) Die gemäß Abs. 2 bis 4 wählbaren Module dürfen nicht mit Modulen, die bereits im Bachelorstudiengang absolviert wurden, übereinstimmen. Im Zweifelsfall entscheidet hierüber der Prüfungsausschuss; die Klärung soll vor Absolvierung des fraglichen Moduls vorgenommen werden.

## **§ 8 Lehr- und Lernformen**

(1) Im Rahmen des Lehrangebots für den Masterstudiengang werden folgende Lehr- und Lernformen angeboten:

1. Vorlesung (V): Vorlesungen dienen der Vermittlung der theoretischen Grundlagen der jeweiligen Schwerpunkte, vermitteln Theorien und Methoden der Analyse und setzen sich kritisch mit dem Stand der Computerwissenschaften auseinander.
2. Grundkurs (GK): Grundkurse haben einführenden oder grundlegenden Charakter. Die vorrangige Lehrform ist der Vortrag der jeweiligen Lehrkraft im Präsenzunterricht sowie von ihr moderierte Gespräche und Diskussionen zu grundlegenden Themen, Problemen oder Fragestellungen.
3. Seminar (S): Seminare dienen der Erörterung methodischer Fragen und setzen sich kritisch mit den Anwendungsmöglichkeiten und Einsatzgebieten auseinander.
4. Projektseminar (PS): Projektseminare dienen der intensiven Auseinandersetzung mit einem exemplarischen Themenbereich und der Einübung selbstständigen wissenschaftlichen Arbeitens. Es werden unter Anleitung einer Lehrkraft Lehrinhalte von Studentinnen und Studenten in Projektarbeit auf ein konkretes Problem der Computerwissenschaften angewendet.

Die Ergebnisse werden aufgearbeitet, präsentiert und diskutiert. Der Selbststudienanteil ist höher als im Seminar.

5. Laborpraktikum (LaP): Laborpraktika dienen der praktischen Anwendung von neu erworbenem Wissen und methodischen Fähigkeiten im Bereich Labormethoden.
6. Praktikum (P): Praktika dienen der selbstständigen Erarbeitung von Fragestellungen und Lösungsmöglichkeiten an ausgewählten Objekten mit geeigneten Methoden und ermöglichen das Erlernen von praktisch-handwerklichen und analytischen Fähigkeiten.
7. Übung (Ü): Übungen dienen der Vermittlung von Arbeitstechniken, Praxis- oder Computerkenntnissen.
8. Seminar am PC (SPC): Seminare am PC dienen der Übung und Vertiefung von theoretischen Lehrinhalten anhand von Computersimulationen.

(2) Die Lehr- und Lernformen gemäß Abs. 1 können in Blended-Learning-Arrangements umgesetzt werden. Das Präsenzstudium wird hierbei mit elektronischen Internet-basierten Medien (E-Learning) verknüpft. Dabei werden ausgewählte Lehr- und Lernaktivitäten über die zentralen E-Learning-Anwendungen der Freien Universität Berlin angeboten und von den Studentinnen und Studenten einzeln oder in einer Gruppe selbstständig und/oder betreut bearbeitet. Blended Learning kann in der Durchführungsphase (Austausch und Diskussion von Lernobjekten, Lösung von Aufgaben, Intensivierung der Kommunikation zwischen den Lernenden und Lehrenden) bzw. in der Nachbereitungsphase (Lernerfolgskontrolle, Transferunterstützung) eingesetzt werden.

## **§ 9 Masterarbeit**

(1) Die Masterarbeit soll zeigen, dass die Studentin oder der Student in der Lage ist, eine Fragestellung aus dem Gebiet der Computational Sciences auf fortgeschrittenem wissenschaftlichen Niveau selbstständig zu bearbeiten und die Ergebnisse angemessen schriftlich und mündlich darzustellen, wissenschaftlich einzuordnen und zu dokumentieren.

(2) Studentinnen und Studenten werden auf Antrag zur Masterarbeit zugelassen, wenn sie bei Antragstellung nachweisen, dass sie

1. im Masterstudiengang zuletzt an der Freien Universität Berlin immatrikuliert gewesen sind und
2. bereits alle Module des Synchronisierungsbereichs im Umfang von 30 LP und Module im Masterstudiengang im Umfang von insgesamt 60 LP oder mehr erfolgreich absolviert haben.

(3) Dem Antrag auf Zulassung zur Masterarbeit sind Nachweise über das Vorliegen der Voraussetzungen gemäß Abs. 2 beizufügen, ferner die Bescheinigung einer prüfungsberechtigten Lehrkraft über die Bereitschaft zur Übernahme der Betreuung der Masterarbeit. Der zustän-

dige Prüfungsausschuss entscheidet über den Antrag. Wird eine Bescheinigung über die Übernahme der Betreuung der Masterarbeit gemäß Satz 1 nicht vorgelegt, so setzt der Prüfungsausschuss eine Betreuerin oder einen Betreuer ein.

(4) Der Prüfungsausschuss gibt in Abstimmung mit der Betreuerin oder dem Betreuer das Thema der Masterarbeit aus. Die Studentinnen und Studenten erhalten Gelegenheit eigene Themenvorschläge zu machen, ein Anspruch auf deren Umsetzung besteht nicht. Thema und Aufgabenstellung müssen so beschaffen sein, dass die Bearbeitung innerhalb der Bearbeitungsfrist abgeschlossen werden kann. Ausgabe und Fristeinholung sind aktenkundig zu machen.

(5) Die Masterarbeit soll etwa 30 bis 80 Seiten umfassen. Die Bearbeitungszeit für die Masterarbeit beträgt 23 Wochen. Sie soll in englischer Sprache abgefasst werden. War eine Studentin oder ein Student über einen Zeitraum von mehr als drei Monaten aus triftigem Grund an der Bearbeitung gehindert, entscheidet der Prüfungsausschuss, ob die Masterarbeit neu erbracht werden muss. Die Prüfungsleistung hinsichtlich der Masterarbeit gilt für den Fall, dass der Prüfungsausschuss eine erneute Erbringung verlangt, als nicht unternommen.

(6) Die Masterarbeit wird durch ein Kolloquium begleitet, das in der Regel in der zugeordneten Arbeitsgruppe stattfindet. Die Studentinnen und Studenten sollen einmal einen ca. 30-minütigen Vortrag über den Fortgang ihrer Masterarbeit halten.

(7) Als Beginn der Bearbeitungszeit gilt das Datum der Ausgabe des Themas durch den Prüfungsausschuss. Das Thema kann einmalig innerhalb der ersten vier Wochen zurückgegeben werden und gilt dann als nicht ausgegeben. Bei der Abgabe hat die Studentin oder der Student schriftlich zu versichern, dass sie oder er die Masterarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt hat. Die Masterarbeit ist in drei maschinenschriftlichen gebundenen Exemplaren sowie in elektronischer Form im Portable-Document-Format (PDF) abzugeben. Die PDF-Datei muss den Text maschinenlesbar, nicht nur grafisch enthalten und darf keine Rechtebeschränkung aufweisen.

(8) Die Masterarbeit ist innerhalb von vier Wochen von zwei vom Prüfungsausschuss bestellten Prüfungsberechtigten mit einer schriftlichen Begründung zu bewerten. Dabei soll die Betreuerin oder der Betreuer der Masterarbeit eine oder einer der Prüfungsberechtigten sein. Der Prüfungsausschuss stellt sicher, dass das Gutachterpaar sowohl den Spezialisierungsbereich als auch die mathematisch/informatischen Grundlagen inhaltlich vertritt. Bei einer Differenz von 2,0 oder mehr zwischen den Noten der zwei Gutachten wird ein drittes Gutachten eingeholt.

(9) Die Masterarbeit ist bestanden, wenn die Note für die Masterarbeit mindestens „ausreichend“ (4,0) ist.

### § 10 Wiederholung von Prüfungsleistungen

(1) Im Falle des Nichtbestehens dürfen die Masterarbeit einmal, sonstige studienbegleitende Prüfungsleistungen dreimal wiederholt werden.

(2) Mit „ausreichend“ (4,0) oder besser bewertete Prüfungsleistungen in Form einer Klausur dürfen einmalig zur Notenverbesserung in einer Nachklausur, die spätestens in der ersten Vorlesungswoche des Folgesemesters stattfindet, wiederholt werden. Gewertet wird die Note mit dem besseren Ergebnis. Im Fall von Wiederholungsprüfungen ist eine Notenverbesserung ausgeschlossen.

### § 11 Elektronische Prüfungsleistungen

(1) Bei elektronischen Prüfungsleistungen erfolgt die Durchführung und Auswertung unter Verwendung von digitalen Technologien.

(2) Vor einer Prüfungsleistung unter Verwendung von digitalen Technologien ist die Eignung dieser Technologien im Hinblick auf die vorgesehenen Prüfungsaufgaben und die Durchführung der elektronischen Prüfungsleistung von zwei Prüferinnen oder Prüfern festzustellen.

(3) Die Authentizität des Urhebers und die Integrität der Prüfungsergebnisse sind sicherzustellen. Hierfür werden die Prüfungsergebnisse in Form von elektronischen Daten eindeutig identifiziert sowie unverwechselbar und dauerhaft der Studentin oder dem Studenten zugeordnet. Es ist zu gewährleisten, dass die elektronischen Daten für die Bewertung und Nachprüfbarkeit unverändert und vollständig sind.

(4) Eine automatisiert erstellte Bewertung einer Prüfungsleistung ist auf Antrag der geprüften Studentin oder des geprüften Studenten von einer Prüferin oder einem Prüfer zu überprüfen.

### § 12 Auslandsstudium

(1) Den Studentinnen und Studenten wird ein Auslandsstudienaufenthalt empfohlen. Im Rahmen des Auslandsstudiums sollen Leistungen erbracht werden, die für den Masterstudiengang anrechenbar sind.

(2) Dem Auslandsstudium soll der Abschluss einer Vereinbarung zwischen der Studentin oder dem Studenten, der oder dem Vorsitzenden des für den Masterstudiengang zuständigen Prüfungsausschusses sowie der zuständigen Stelle an der Zielhochschule über die Dauer des Auslandsstudiums, über die im Rahmen des Auslandsstudiums zu erbringenden Leistungen, die gleichwertig zu den Leistungen im Masterstudiengang sein müssen, sowie die den Leistungen zugeordneten Leistungspunkte vorausgehen. Vereinbarungsgemäß er-

brachte Leistungen sowie gleichwertige Leistungen werden angerechnet.

(3) Es wird empfohlen, das Auslandsstudium während des 2. oder 3. Fachsemesters des Masterstudiengangs zu absolvieren.

### **§ 13**

#### **Studienabschluss**

(1) Voraussetzung für den Studienabschluss ist, dass die gemäß den §§ 7 und 9 dieser Ordnung geforderten Leistungen erbracht worden sind.

(2) Der Studienabschluss ist ausgeschlossen, soweit die Studentin oder der Student an einer Hochschule im gleichen Studiengang oder in einem Modul, welches mit einem der im Masterstudiengang zu absolvierenden und bei der Ermittlung der Gesamtnote zu berücksichtigenden Module identisch oder vergleichbar ist, Leistungen endgültig nicht erbracht oder Prüfungsleistungen endgültig nicht bestanden hat oder sich in einem schwebenden Prüfungsverfahren befindet.

(3) Dem Antrag auf Feststellung des Studienabschlusses sind Nachweise über das Vorliegen der Voraussetzungen gemäß Abs. 1 und eine Versicherung beizufügen, dass für die Person der Antragstellerin oder des Antragstellers keiner der Fälle gemäß Abs. 2 vorliegt. Über den Antrag entscheidet der zuständige Prüfungsausschuss.

(4) Aufgrund der bestandenen Prüfung wird der Hochschulgrad Master of Science (M. Sc.) verliehen. Die Studentinnen und Studenten erhalten ein Zeugnis und eine Urkunde (Anlagen 3 und 4), sowie ein Diploma Supplement (englische und deutsche Version). Darüber hinaus wird eine Zeugnisergänzung mit Angaben zu den einzelnen Modulen und ihren Bestandteilen (Transkript) erstellt. Auf Antrag werden ergänzend englische Versionen von Zeugnis und Urkunde ausgehändigt.

### **§ 14**

#### **Inkrafttreten**

Diese Ordnung tritt am Tage nach ihrer Veröffentlichung in den FU-Mitteilungen (Amtsblatt der Freien Universität Berlin) in Kraft.

### Anlage 1: Modulbeschreibungen

#### Erläuterungen:

Die folgenden Modulbeschreibungen benennen, soweit nicht auf andere Ordnungen verwiesen wird, für jedes Modul des Masterstudiengangs

- die Bezeichnung des Moduls,
- den/die Verantwortlichen des Moduls,
- die Voraussetzungen für den Zugang zum jeweiligen Modul,
- Inhalte und Qualifikationsziele des Moduls,
- Lehr- und Lernformen des Moduls,
- den studentischen Arbeitsaufwand, der für die erfolgreiche Absolvierung eines Moduls veranschlagt wird,
- Formen der aktiven Teilnahme,
- die Prüfungsformen,
- die Pflicht zu regelmäßiger Teilnahme,
- die den Modulen zugeordneten Leistungspunkte,
- die Regeldauer des Moduls,
- die Häufigkeit des Angebots,
- die Verwendbarkeit des Moduls,

Die Angaben zum zeitlichen Arbeitsaufwand berücksichtigen insbesondere,

- die aktive Teilnahme im Rahmen der Präsenzstudienzeit,
- den Arbeitszeitaufwand für die Erledigung kleinerer Aufgaben im Rahmen der Präsenzstudienzeit,
- die Zeit für eine eigenständige Vor- und Nachbereitung,
- die Bearbeitung von Studieneinheiten in den Online-Studienphasen,
- die unmittelbare Vorbereitungszeit für Prüfungsleistungen,
- die Prüfungszeit selbst.

Die Zeitangaben zum Selbststudium (unter anderem Vor- und Nachbereitung, Prüfungsvorbereitung) stellen Richtwerte dar und sollen den Studentinnen und Studenten Hilfestellung für die zeitliche Organisation ihres modulbezogenen Arbeitsaufwands liefern. Die Angaben zum Arbeitsaufwand korrespondieren mit der Anzahl der dem jeweiligen Modul zugeordneten Leistungspunkte als Maßeinheit für den studentischen Arbeitsaufwand, der für die erfolgreiche Absolvierung des Moduls in etwa zu erbringen ist. Ein Leistungspunkt entspricht 30 Stunden.

Soweit für die jeweiligen Lehr- und Lernformen die Pflicht zu regelmäßiger Teilnahme festgelegt ist, ist sie neben der aktiven Teilnahme an den Lehr- und Lernformen und der erfolgreichen Absolvierung der Prüfungsleistungen eines Moduls Voraussetzung für den Erwerb der dem jeweiligen Modul zugeordneten Leistungspunkte. Eine regelmäßige Teilnahme liegt vor, wenn mindestens 80 % der in den Lehr- und Lernformen eines Moduls vorgesehenen Präsenzstudienzeit besucht wurden. Besteht keine Pflicht zu regelmäßiger Teilnahme an einer Lehr- und Lernform eines Moduls, so wird sie dennoch dringend empfohlen. Die Festlegung einer Präsenzpflcht durch die jeweilige Lehrkraft ist für Lehr- und Lernformen, für die im Folgenden die Teilnahme lediglich empfohlen wird, ausgeschlossen.

Zu jedem Modul muss – soweit vorgesehen – die zugehörige Modulprüfung abgelegt werden. Benotete Module werden mit nur einer Prüfungsleistung (Modulprüfung) abgeschlossen. Die Modulprüfung ist auf die Qualifikationsziele des Moduls zu beziehen und überprüft die Erreichung der Ziele des Moduls exemplarisch. Der Prüfungsumfang wird auf das dafür notwendige Maß beschränkt. In Modulen, in denen alternative Prüfungsformen vorgesehen sind, ist die Prüfungsform des jeweiligen Semesters von der verantwortlichen Lehrkraft spätestens im ersten Lehrveranstaltungstermin festzulegen.

Die aktive und – soweit vorgesehen – regelmäßige Teilnahme an den Lehr- und Lernformen sowie die erfolgreiche Absolvierung der Prüfungsleistungen eines Moduls sind Voraussetzung für den Erwerb der dem jeweiligen Modul zugeordneten Leistungspunkte.



I. Synchronisierungsbereich

1. Pflichtmodul

<b>Modul:</b> Computational Sciences			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten erlernen die interdisziplinären Grundzüge wissenschaftlicher Arbeit in den „computational sciences“. Sie sind in der Lage, Probleme der quantitativen Naturwissenschaften theoretisch zu beschreiben bzw. die Realwelt-Bedeutung der involvierten Gleichungen zu verstehen. Sie können das Problem in Algorithmen formulieren bzw. rechnergestützte Lösungsmethoden identifizieren. Sie können diese rechnergestützten Verfahren numerisch beschreiben und entsprechend stabile Lösungsmethoden auswählen. Sie können diese Algorithmen implementieren, ihre Laufzeit- und Speichereffizienz bewerten und optimieren.			
<b>Inhalte:</b> Hauptinhalt dieses Moduls ist das Erlernen von Arbeitsmethoden. Es werden 1 bis 3 Probleme von disziplinübergreifender Relevanz ausgewählt, und an diesen Beispielen naturwissenschaftliche Theorie, Algorithmik, Numerik und Effizienz durchexerziert. In den Computerübungen werden Implementierungen der entsprechenden Probleme in Teamarbeit entwickelt, getestet und optimiert. Beispiele für geeignete Probleme sind u. a.: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Schwingungsphänomene und Spektralanalyseverfahren:</i> Wellen und Schwingungen in der Physik, Fourier- und Laplace-Transformation, Diskretisierung, DFT, FFT, Implementierung, Stabilitätsanalyse, Laufzeitanalyse, Code-Optimierung, Hardwarebeschleunigung.</li> <li>• <i>Gravitation, Elektrostatik und Berechnungsverfahren:</i> Gravitationsproblem und Coulomb-Gesetz, Periodische Systeme und Konvergenz, Ewald-Summierung, Fehleranalyse, Particle-Mesh-Ewald, Effiziente Implementierung, Hardwarebeschleunigung.</li> <li>• <i>Wärmeleitungsgleichung, Poissongleichung und Lösungsverfahren:</i> Wärmeleitungsgleichung, Poissongleichung, parabolische PDEs, PDE, Analytische Lösungen für Spezialfälle, Gebietszerlegung/Finite-Elemente-Approximation, Lösung mit algebraischen Methoden, Implementierung, Konvergenzanalyse, Code-Optimierung, Hardwarebeschleunigung.</li> <li>• <i>Datenanalyse und Dimensionsreduktion:</i> Beispiele korrelierter, hochdimensionaler Signale, Hauptkomponentenanalyse, Rayleigh-Koeffizient und Optimalitätsprinzip, Eigenwertproblem, Singulärwertzerlegung und herkömmliche Lösungsverfahren, Nyström-Approximation und sparse sampling, Effiziente Implementierung.</li> </ul>			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	Erfolgreiche Ausarbeitung einer effizienten kommentierten Implementierung im Team. Regelmäßige Präsentation von Zwischenergebnissen. Erfolgreiche Bearbeitung von projektbegleitenden Aufgaben.	Präsenzzeit V 60
Projektseminar	4		Vor- und Nachbereitung V 120
			Präsenzzeit PS 60
			Vor- und Nachbereitung PS 160
			Prüfungsvorbereitung und Prüfung 50
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (120 Minuten)	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Jedes Wintersemester	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## 2. Fachliche Angebote

### a) Chemie

<b>Modul:</b> Einführung in die Molekülspektroskopie			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie			
<b>Modulverantwortliche/er:</b> Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Erfolgreich absolviertes Modul „Atombau und chemische Bindung“ (8 LP) des Bachelorstudiengangs Chemie des Fachbereichs Biologie, Chemie und Pharmazie der Freien Universität Berlin oder vergleichbare Kenntnisse in der Quantenmechanik			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können Rotations-, Schwingungs- und elektronische Spektren als wichtige Hilfsmittel zur Erforschung der geometrischen Struktur, der elektronischen Struktur sowie energetischer und weiterer Eigenschaften von Molekülen bis hin zur qualitativen Analyse größerer Moleküle anwenden. Durch aktuelle Beispiele der optischen Spektroskopie haben die Studentinnen und Studenten ein vertieftes Wissen über die Zusammenhänge und verstehen die fundamentale Bedeutung der Spektroskopie in Wissenschaft und Technik. Sie lösen Übungsaufgaben und besprechen ihre Lösungen in Gruppen.			
<b>Inhalte:</b> Physikalische Grundlagen der elektromagnetischen Strahlung, Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie mit/ohne Absorption und Emission von Photonen, experimentelle Aspekte, Rotationspektroskopie, Schwingungsspektroskopie, elektronische Übergänge.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü 30
Übung	2	Bearbeitung von Übungsaufgaben, Diskussionsbeiträge	Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (120 Minuten) oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Einführung in die Theoretische Chemie			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie			
<b>Modulverantwortliche/er:</b> Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten kennen grundlegende analytische und numerische Konzepte und Methoden der Theoretischen Chemie. Sie können zeitunabhängige und zeitabhängige quantenmechanische Methoden für ausgewählte Modellsysteme der Chemie anwenden und verfügen über die numerischen Fähigkeiten entsprechende Computersimulationen durchzuführen. Dadurch erlangen sie ein vertieftes Verständnis für Eigenschaften von Molekülen und chemischen Reaktionen.			
<b>Inhalte:</b> Vertiefende mathematische Darstellung der zeitunabhängigen und zeitabhängigen Quantenmechanik, Lösen von quantenmechanischen Ein-Teilchen-Problemen (freies Teilchen, harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom), Kern-dynamik (Schwingung und Rotation), Kernschwingungen mehratomiger Moleküle, zeitabhängige und zeitunabhängige Störungsrechnung, ausgewählte numerische Lösungsverfahren zur Berechnung von zeitabhängigen quantenmechanischen Modellsystemen.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochen- stunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü 15 betreute Computerübung 15
Übung	1	Diskussionsbeteiligung, Präsentation ausgewählter Simulationsergebnisse	Selbststudium am Rechner Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Praktische Prüfung (ca. 30 Minuten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Jedes Wintersemester	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Science	

<b>Modul:</b> Quantenmechanische Beschreibung von Atomen und chemischer Bindung			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie			
Modulverantwortliche/r: Dozentinnen oder Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben ein grundlegendes Verständnis der Quantenmechanik und ihrer Anwendung auf einfache, chemisch relevante Beispiele. Sie können die Elektronenstruktur von Atomen und kleinen Molekülen mit mathematischen Werkzeugen beschreiben und kennen Atommodelle und die quantenmechanischen Grundlagen spektroskopischer Messungen. Sie kennen die quantentheoretischen Zusammenhänge von Orbitalen und chemischer Bindung. Sie können eigenständig und in Gruppen einfache Fragestellungen zur Quantennatur chemischer Modellsysteme analytisch und mit ausgewählten numerischen Methoden bearbeiten, diese didaktisch aufbereiten und Gender- und Diversity-spezifisch präsentieren.			
<b>Inhalte:</b> Einführung in die Quantennatur der Materie und Energie, Grundlagen der Quantentheorie, quantenmechanische Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für chemisch relevante Modellsysteme, Quantentheorie des Bahndrehimpulses und des Spins. Quantenmechanik des Wasserstoffatoms, Mehrelektronenatome, Spin-Bahn-Kopplung, Theorie der Chemischen Bindung, elementare Quantentheorie einfacher Moleküle. Analytische und numerische Lösungsansätze für einfache quantenmechanische Probleme.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 70 Präsenzzeit Ü 30
Übungen	2	Bearbeitung von Übungsaufgaben, Diskussionsbeiträge Erarbeitung eines quantentheoretischen Themas mit numerischen Methoden und dessen Präsentation	Vor- und Nachbereitung Ü 70 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (180 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		300 Stunden	10 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Jedes Semester	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

b) Geographische Wissenschaften

<b>Modul:</b> Grundlagen der Fernerkundung und digitalen Bildverarbeitung			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten verfügen über grundlegende Fähigkeiten und Fertigkeiten der digitalen geowissenschaftlichen Fernerkundung und digitalen Bildverarbeitung. Sie können eigenständig und in Gruppen Fragenstellungen zur Fernerkundung und Bildverarbeitung mit ausgewählten numerischen Methoden bearbeiten, diese didaktisch aufbereiten und Gender- und Diversity-spezifisch präsentieren.			
<b>Inhalte:</b> Es wird eine theoretische Einführung in die Thematik gegeben und ausgewählte Aspekte an praktischen Beispielen mithilfe gängiger Softwarepakete vertieft und geübt. Gegenstand sind die Grundlagen von: <ul style="list-style-type: none"> <li>– Einführung in die Strahlungsphysik</li> <li>– Grundlagen der Photogrammetrie</li> <li>– digitale und analoge passive Aufnahmesysteme</li> <li>– Visualisierung multispektraler Daten</li> <li>– Grundlagen Bildverarbeitung</li> <li>– spezielle Informationsextraktion (z. B. Indizes, PCA)</li> <li>– Interpretation von Fernerkundungsdaten</li> <li>– Zeitreihenanalyse mit Rasterdaten (Change Detection)</li> <li>– multispektrale Klassifizierungsverfahren</li> <li>– Einführung in aktive Fernerkundungssysteme</li> </ul>			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 20 Präsenzzeit S 30
Seminar	2	Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 25 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 45
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr, jedes Wintersemester	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## FU-Mitteilungen

<b>Modul:</b> Grundlagen der Hydro- und Klimageographie			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten beherrschen die grundlegenden Kenntnisse der Klima- und Hydrogeographie, insbesondere die Fachterminologie und können sie im wissenschaftlichen Diskurs anwenden. Sie können globale Zusammenhänge des Klimasystems inklusive der Wechselwirkung mit den Ozeanen, der Allgemeinen Zirkulation der Atmosphäre und Elemente des Wasserkreislaufs beschreiben.			
<b>Inhalte:</b> Es werden die Grundlagen der Klima- und Hydrogeographie dargestellt. Dazu zählen u. a. die Grundlagen des Klimasystems, Strahlungs- und Wärmehaushalt, Allgemeine Zirkulation der Atmosphäre, Klimaklassifikationen, Rolle der Ozeane im Klimasystem, Elemente des Wasserkreislaufs und deren raumzeitliche Ausprägung und messtechnische Erfassung sowie Wasserbilanz und Wasserhaushalt auf unterschiedlichen Maßstabsebenen. Ausgewählte Inhalte werden vertieft. Hierzu werden selbstständig oder in Kleingruppen Übungsaufgaben bearbeitet. Zusätzlich wird eine Einführung in wissenschaftliches Arbeiten, insbesondere in den Umgang mit Fachliteratur, z. B. Grundlagen der Literaturlaufbereitung und des korrekten Zitierens wissenschaftlicher Texte, vermittelt.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 15 Präsenzzeit S 30
Seminar	2	Übungsaufgaben, Referat	Vor- und Nachbereitung S 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 45
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr, jedes Wintersemester	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Grundlagen von geographischen Informationssystemen			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten verfügen über grundlegende Fähigkeiten und Fertigkeiten der digitalen, räumlichen Informationsverarbeitung für das geowissenschaftliche Arbeiten. Sie können eigenständig und in Gruppen Fragenstellungen zu geographischen Informationssystemen mit ausgewählten rechnergestützten Methoden bearbeiten, diese didaktisch aufbereiten und Gender- und Diversity-spezifisch präsentieren.			
<b>Inhalte:</b> Es werden eine theoretische Einführung in die Thematik gegeben und ausgewählte Aspekte an praktischen Beispielen mithilfe gängiger Softwarepakete vertieft und geübt. Dabei werden Grundlagen von: <ul style="list-style-type: none"> <li>– Struktur und Anwendungen von Geoinformationssystemen</li> <li>– Datenmodelle (Raster-/Vektordaten)</li> <li>– Methoden und Probleme der Abbildung des Georaumes (geodätische Referenzsysteme)</li> <li>– Georeferenzierung</li> <li>– Extraktion und Verarbeitung von Vektordaten</li> <li>– Verarbeitung räumlicher und attributiver Informationen</li> <li>– Geodatenbanken</li> <li>– Interpolationsverfahren</li> <li>– Erstellung und Analyse digitaler Geländemodelle</li> <li>– Extraktion hydrologischer Parameter</li> <li>– Visualisierung von Geodaten</li> <li>– Schnittstellen der Geodatenverarbeitung</li> <li>– Entwicklung und Erstellung und von Karten</li> <li>– Grundlagen der Fernerkundung</li> </ul> behandelt.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 20 Präsenzzeit S 30
Seminar	2	Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 25 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 45
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr, jedes Sommersemester	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## c) Geologische Wissenschaften

<b>Modul:</b> Synchronisierung Erde			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten verfügen über ein grundlegendes Verständnis für Struktur, Zusammensetzung und Prozesse unseres Planeten sowie für die Einzigartigkeit der Erde im planetarischen Vergleich. Sie sind mit den physischen und chemischen Prozessen, die oberflächengestaltend wirken, und ihren Antriebskräften im Erdinneren vertraut. Sie kennen den Erdaufbau und seine Bedeutung und kennen Methoden, die Geowissenschaftler zur Erkundung des Erdinneren benutzen. Die Studentinnen und Studenten kennen die geologischen Kreisläufe und ihre Zeitrahmen. Sie sind in der Lage, die wichtigsten gesteinsbildenden Minerale und Gesteine zu identifizieren und können diese den Bildungsbedingungen zuordnen. Die Studentinnen und Studenten verfügen über ein weiterführendes Verständnis für Struktur, Zusammensetzung und Prozesse unseres Planeten. Sie besitzen ein grundlegendes Verständnis für die Interaktivität zwischen festem Erdkörper, Atmosphäre, Hydrosphäre und Biosphäre sowie für (vorwiegend exogene) Prozesse auf verschiedenen Zeitskalen.			
<b>Inhalte:</b> Es werden die Themen Fundamentale Systeme und Prozesse des Planeten Erde, Raum und Zeit, Stoffbestand, geowissenschaftliche Kreisläufe, Interaktion zwischen Hydrosphäre, Atmosphäre, Geosphäre; relatives und absolutes Alter, sedimentäre Zyklen (Verwitterung Erosion, Sedimentation), phänomenologische Geophysik, Magmatismus, Metamorphose, Struktur, Plattentektonik, Prozesse und gegenseitiges Wechselspiel von Tektonik, Verwitterung, Erosion, Klima, Transportvorgängen und Ablagerungsräumen in Abhängigkeit von exogenen und endogenen Variablen; Einfluss von Organismen auf diese Prozesse; Kohlenstoffkreislauf; Klimawechsel; Oberflächengestaltende Prozesse im Wechselspiel zwischen Klima, atmosphärischer Zusammensetzung, Tektonik; Massenbilanzen und Massenflüsse im globalen Systemangeboten. Die Studentinnen und Studenten befassen sich mit der Makroskopische Bestimmung von Mineralen und Gesteinen.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Grundkurs 1	2	–	Präsenzzeit GK1 30 Vor- und Nachbereitung GK1 45
Praktikum	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Präsenzzeit P 30 Vor- und Nachbereitung P 60 Präsenzzeit GK2 30 Vor- und Nachbereitung GK2 45
Grundkurs 2	2	–	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 60
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		300 Stunden	10 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr (GK1 und P im Wintersemester, GK2 im Sommersemester)	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	



d) Informatik

<b>Modul:</b> Complex Algorithms A
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine
<p><b>Qualifikationsziele:</b></p> <p>Die Studentinnen und Studenten beherrschen grundlegende Kenntnisse der gängigen Entwurfstechniken für Algorithmen und können Algorithmen mit ihrer Hilfe entwerfen. Sie können Algorithmen in Bezug auf ihren Laufzeit- und Speicherbedarf analysieren und dabei auch fortgeschrittene Analysemethoden verwenden. Sie haben ein Grundlegendes Verständnis der Theorie der NP-Vollständigkeit. Sie kennen die gängigen Komplexitätsklassen und können einfache Probleme in ihrer Komplexität einordnen. Sie vertiefen diese Fähigkeiten selbstständig in einem ausgewählten Themengebiet der höheren Informatik. Die Studentinnen und Studenten können Komplexere Algorithmen auf eines der folgenden Themen anwenden: Verteilte Systeme, Mustererkennung, Datenbanktechnologie oder Künstliche Intelligenz.</p>
<p><b>Inhalte:</b></p> <p>Es werden Aspekte folgender Themen behandelt: Wege- und Flussprobleme in Graphen, String-Matching, randomisierte Algorithmen, amortisierte Analyse, das „Master-Theorem“ zur Analyse von Teile-und-herrsche-Rekursionsgleichungen, NP-Vollständigkeit, Approximationsalgorithmen für schwere Probleme, zahlentheoretische Algorithmen (einschließlich RSA-Kryptosystem), Arithmetische Algorithmen und Schaltkreise sowie schnelle Fourier-Transformation. Diese werden anschließend exemplarisch vertieft bearbeitet. Es stehen folgenden Themen zur Verfügung:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– Verteilte Systeme, Verteilte Algorithmen, Verteilte Datenverwaltung, Suchverfahren für die Lösung kombinatorischer Aufgaben,</li> <li>– Prädikatenlogik und ihre Mechanisierung, Resolution und Theorembeweise, wissensbasierte und Expertensysteme, Diffuse Logik,</li> <li>– Baye'sche Verfahren der Mustererkennung, Clustering, Expectation-Maximization, Neuronale Netze und Lernalgorithmen, Assoziative Netze, Rekurrente Netze. Computer-Vision mit neuronalen Netzen,</li> <li>– Datenbank-Zugriffstechniken und Anfrageoptimierung, Realisierung von Transaktionen, insbesondere Synchronisationsverfahren, die technische Maßnahmen, die Datenbanksysteme fehlertolerant machen. Verfahren zur effizienten Verwaltung andersartiger großer Datenbestände, insbesondere von XML-Dokumenten, korrekte Implementierung transaktionaler Garantien in Datenverwaltungssystemen.</li> </ul>

## FU-Mitteilungen

Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Computer Science and Data Structures A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben grundlegende Fähigkeiten zur Entwicklung von objektorientierter Software: Sie beherrschen den Umgang mit Datenabstraktion, Vererbung und polymorphen Typsystemen und sind in der Lage, abstrakte Datentypen zu spezifizieren und zu implementieren, Korrektheitsbeweise für die Implementierungen abstrakter Datentypen durchzuführen und unter Einbeziehung von Effizienzanalysen eine Entscheidung über die jeweils zu wählende Datenrepräsentation zu treffen. Sie kennen die wichtigsten abstrakten Datentypen und ihre gängigen Implementierungen sowie die entsprechenden Schnittstellen und Klassen aus den Bibliotheken der verwendeten Programmiersprache.			
<b>Inhalte:</b> Ausgangspunkt ist das Geheimnisprinzip und seine Bedeutung für die Strukturierung von Programmen und die Konstruktion von Datenobjekten mittels Modulen und Klassen. Eine zentrale Rolle bei der Modellierung von Daten spielt der Begriff der Datenabstraktion, verbunden mit der Unterscheidung zwischen Spezifikation und Implementierung abstrakter Datenobjekte und Datentypen. Folgen, Mengen, Relationen, Bäume, Graphen und geometrische Objekte werden als abstrakte Typen eingeführt. Anschließend werden effizient manipulierbare Repräsentationen dieser Typen betrachtet und die zugehörigen Algorithmen auf ihre Komplexität hin untersucht.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Programmierprojekts	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Computer Science and Functional Programming A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten sind in der Lage, elementare Algorithmen funktional zu entwerfen, Anforderungen an funktionale Programme formal zu spezifizieren, gut strukturierte funktionale Programme zu entwickeln, funktionale Programme hinsichtlich ihres Aufwandes zu untersuchen und Eigenschaften funktionaler Programme formal zu beweisen. Sie haben ein grundlegendes Verständnis der Berechenbarkeit.			
<b>Inhalte:</b> Grundlagen der Berechenbarkeit (Lambda-Kalkül, primitive Rekursion, $\mu$ -Rekursion). Einführung in die Funktionale Programmierung (Syntax, primitive Datentypen, Listen, Tupel, Zeichenketten, Ausdrücke, Funktionsdefinitionen, Rekursion und Iteration, Funktionen höherer Ordnung, Polymorphie, Typsystem, Typherleitung und Überprüfung, Algebraische und abstrakte Datentypen, Ein- und Ausgabe, Such- und Sortieralgorithmen). Beweisen von Programmeigenschaften (Termersetzung, strukturelle Induktion, Terminierung). Implementierung und Programmier-technik (Auswertungsstrategien für funktionale Programme, modularer Programmentwurf).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochen- stunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Programmierprojekts	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Computer Science and Object-Oriented Programming A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten sind in der Lage Algorithmen zustandsbezogen zu spezifizieren, gut strukturierte imperative Programme zu entwickeln, imperative Programme hinsichtlich ihrer Komplexität zu analysieren und Eigenschaften imperativer Programme formal zu beweisen.			
<b>Inhalte:</b> Grundlagen der Berechenbarkeit (universelle Registermaschinen, Syntax und operationelle Semantik imperativer Programmiersprachen), Formale Verfahren zur Spezifikation und Verifikation imperativer Programme (Bedingungen auf dem Zustandsraum, Hoare-Kalkül, partielle Korrektheit, Termination), Konzepte imperativer und objekt-orientierter Programmierung (primitive und zusammengesetzte Datentypen, Methoden, Parameterübergabe, Überladung, Module, Klassen, Objekte, Klassenhierarchien, Vererbung, abstrakte Klassen, Schnittstellen), Programmiermethodik (schrittweise korrekte Programmentwicklung, Teile und Herrsche, Backtracking, Analyse von Laufzeit und Speicherbedarf, O-Notation, Umwandlung von Rekursion in Iteration, Analyse von Such- und Sortieralgorithmen).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Programmierprojekts	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## e) Mathematik

<b>Modul:</b> Introduction to Numerical Mathematics A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten beherrschen grundlegende numerische Lösungsverfahren für elementare Probleme der Algebra und gewöhnlicher Differenzialgleichungen. Sie haben ein Gespür für die mathematische Struktur dieser Probleme entwickelt und beherrschen die Auswahl und Entwicklung zuverlässiger und effizienter Lösungsverfahren. Im Rahmen eines Seminars haben die Studentinnen und Studenten das erlernte Wissen auf praktische Probleme des wissenschaftlichen Rechnens übertragen und einen Einblick in die mathematische Modellierung solcher Probleme bekommen.			
<b>Inhalte:</b> Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme, Choleskyzerlegung und QR-Zerlegung. Eigenwertprobleme. Bestapproximation. Interpolation durch Polynome und Splines, Gauß-Quadratur und adaptive Quadratur. Anfangswertprobleme für gewöhnliche Differenzialgleichungen.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Numerics of ODEs and numerical linear algebra A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten besitzen grundlegende Kenntnisse der numerischen Lösung von gewöhnlichen Differenzialgleichungen sowie der numerischen linearen Algebra und können sicher damit umgehen. Im Rahmen eines Seminars haben die Studentinnen und Studenten das erlernte Wissen auf praktische Probleme des wissenschaftlichen Rechnens übertragen und einen Einblick in die mathematische Modellierung solcher Probleme bekommen.			
<b>Inhalte:</b> Auswahl aus folgenden Themen: – Anfangswertprobleme für steife Differenzialgleichungen (Stabilität und asymptotische Stabilität, von Fixpunkten, Testgleichungen) – implizite Runge-Kutta-Verfahren (Vererbungsprinzip, Stabilitätsgebiete, A- und B-Stabilität, Gauß-Verfahren) – differenziell-algebraische Gleichungen (Grundbegriffe, Index) – Hamiltonsche Systeme (Energieerhaltung, Symplektizität, symplektische Runge-Kutta-Verfahren) – iterative Verfahren zur Lösung großer linearer Gleichungssysteme (Lineare Iterationsverfahren, Vorkonditionierung, Abstiegsverfahren, Verfahren der konjugierten Gradienten).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch oder Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Numerics of partial differential equations A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten besitzen grundlegende Kenntnisse der numerischen Lösung von partiellen Differenzialgleichungen sowie der numerischen linearen Algebra und können sicher damit umgehen. Im Rahmen eines Seminars haben die Studentinnen und Studenten das erlernte Wissen auf praktische Probleme des wissenschaftlichen Rechnens übertragen und einen Einblick in die mathematische Modellierung solcher Probleme bekommen.			
<b>Inhalte:</b> Auswahl aus folgenden Themen: – mathematische Modellierung mit partiellen Differenzialgleichungen – Klassifikation (elliptisch, parabolisch, hyperbolisch) und Wohlgestelltheit – klassische Lösungen und finite Differenzen (Maximumprinzip, Konsistenz, Konvergenz) – schwache Lösungen und finite Elemente (Sobolev-Räume, Fehlerabschätzungen, Teilraumkorrektur-Methoden) – parabolische Differenzialgleichungen (Linien- und Rothe-Methode).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch oder Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	



<b>Modul:</b> Synchronisierung Mathematik			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Physik sowie Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben einen Überblick über die Struktur und Ziele der Mathematik und ihre Arbeitsweisen. Weiterhin wissen die Studentinnen und Studenten um die zentralen Strukturen und Sätze der Linearen Algebra und des Rechnens mit Matrizen und Vektoren. Sie sind in der Lage, algebraische Probleme auf dem Rechner abzubilden und mit numerischen Verfahren zu lösen.			
<b>Inhalte:</b> – <i>Lineare Algebra:</i> Arbeitsweise und Ziele der Mathematik, Logik, Mengen und Abbildungen, algebraische Strukturen, Körper, reelle Zahlen, komplexe Zahlen, lineare Abbildungen, lineare Gleichungssysteme, Matrizen, Darstellungen und Basistransformationen, Determinanten, Eigenwerte und Eigenvektoren, Skalarprodukt, Orthogonalsysteme. – <i>Computerorientierte Mathematik:</i> Verwendung von Rechnern zur Lösung mathematischer Probleme. Zahlendarstellung, Rundungsfehler, Kondition, Stabilität, Komplexität und Effizienz. – <i>Computeralgebrasysteme:</i> Grundlagen zur Benutzung und skriptgesteuerten Programmierung.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 90 Vor- und Nachbereitung V 150
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Präsenzzeit Ü 60 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Vorlesung	2	–	Schriftliche Übungsaufgaben 60
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten) oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## f) Meteorologie

<b>Modul:</b> Dynamik der Atmosphäre			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben Kenntnisse der auf den Spezialisierungsbereich „Atmospheric Sciences“ zugeschnittenen Hydrodynamik und Thermodynamik, die die theoretischen Grundlagen einer praktischen Wettervorhersage im synoptischen Skalenbereich bilden. Sie sind in der Lage, die wichtigen Entstehungsmechanismen der Hoch- und Tiefdruckgebiete der mittleren Breiten physikalisch zu verstehen und selbstständig zu analysieren.			
<b>Inhalte:</b> Es werden Themen wie Einführung der abgeleiteten Größen Divergenz, Vorticity und Deformation. Umfassende Auswertung der Grundgleichungen zur Gewinnung meteorologischer Aussagen für die synoptische Skala mit Hilfe der abgeleiteten Größen, Diskussion des baroklinen quasigeostrophischen Modells der Atmosphäre, Einführung der grundlegenden Wirbelgrößen und des Konzepts der potenziellen Vorticity, Land-Seewind-Zirkulation, Planetarische Wellen und die wichtigen Instabilitätsprozesse in der Atmosphäre, Theorie der allgemeinen atmosphärischen Zirkulation behandelt.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 50 Präsenzzeit Ü 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung Ü 50 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 50
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		240 Stunden	8 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Einführung in die Dynamik der Atmosphäre			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben Kenntnisse der angewandten Hydrodynamik und Thermodynamik in der Meteorologie. Sie sind mit dem meteorologischen Grundgleichungssystem vertraut und können die Begriffe der Skalen, Erhaltungsgrößen und Windapproximationen im meteorologischen Kontext anwenden.			
<b>Inhalte:</b> Es werden Themen wie Atmosphärische Thermodynamik, Zustandsänderungen atmosphärischer Luft, Statik der Atmosphäre, polytrope Atmosphären, Wasserdampf und latente Wärmen, Grundlagen der Kinematik, Herleitung der prognostischen Grundgleichungen der Meteorologie aus der klassischen Hydrodynamik und Thermodynamik, Skalenbegriffe in der Meteorologie, Lagrangesche und Eulersche Darstellung, natürliche Koordinaten, grundlegende Gleichgewichte (geostrophischer Wind, zyklotropischer Wind, Gradientwind), thermischer Wind behandelt.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 150
<b>Modulprüfung:</b>		Keine	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		210 Stunden	7 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Grundlagen der Synoptischen Meteorologie			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Geowissenschaften			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten verstehen die dreidimensional räumlichen und zeitlichen Strukturen, Prozesse und Wechselwirkungen, welche die Wetterabläufe auf der synoptischen, globalen und konvektiven Skala in den mittleren Breiten bestimmen. Sie können die aktuelle Wetterlage anhand von Wetterkarten analysieren, einordnen, darstellen und bewerten.			
<b>Inhalte:</b> Es werden Themen wie Einführung in die dreidimensionale Diagnose synoptisch-skaliertes Wettersystems der mittleren Breiten: Luftmassen und Fronten, Zyklonen und Antizyklonen, Strahlströme und Wellen der Westwindzone und deren zeitliche Entwicklung und Relation zu Wettererscheinungen behandelt. Zum einen werden praktische Arbeiten am (Graphik-)System Ninjo des DWD angeleitet und selbstständig durchgeführt. Hierbei werden aktuelle Beispiele zu dem Stoff der jeweiligen Vorlesung weltweit analysiert. Zum anderen werden Übungsaufgaben gelöst, um das Basisverständnis für die Inhalte der Vorlesung zu schaffen. Analyse und Diskussion der aktuellen Wetterlage im Europäisch-Atlantischen Sektor anhand verschiedener meteorologischer Felder und Satellitenbilder.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 65
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben, Vortrag	Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 85
<b>Modulprüfung:</b>		Keine	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		210 Stunden	7 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

g) Physik

<b>Modul:</b> Computational Statistical Physics I A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten sind in der Lage, die grundlegenden Konzepte und Sätze der statistischen Physik sowie Thermodynamik zu benennen und zu beschreiben. Weiterhin sind sie in der Lage, die erworbenen Methodenkenntnisse auf gegebene Probleme zu übertragen und diese zu lösen. Die Studentinnen und Studenten haben außerdem die für den Umgang mit der statistischen Physik und Thermodynamik notwendigen Rechenmethoden erlernt und sind in der Lage, diese anzuwenden. Die Studentinnen und Studenten können ihre Methodenkenntnisse und Rechenmethoden im Bereich der statistischen Physik auf komplexe Fragestellungen anwenden.			
<b>Inhalte:</b> Elementare Statistik und Gesetz großer Zahlen, Gleichgewichts-Ensembles, Prinzip der maximalen Entropie, Hauptsätze der Thermodynamik, thermodynamische Potenziale, thermodynamische Prozesse, Phasenübergänge, ideale Quantengase, wechselwirkende Systeme.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Computational Statistical Physics II A			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben grundlegende Kenntnisse über die Konzepte und Sätze der statistischen Physik. Sie können diese benennen, beschreiben und anwenden, die erworbenen Methodenkenntnisse auf gegebene Probleme übertragen und diese lösen. Die Studentinnen und Studenten haben ihre Methodenkenntnisse und Rechenmethoden im Bereich der statistischen Physik erweitert und sind nun in der Lage, diese auf komplexe Fragestellungen anzuwenden. Mit den erlernten Methoden sind Studentinnen und Studenten auch in der Lage, mikroskopische physikalische Prozesse/Gesetzmäßigkeiten auf makroskopischer Ebene abzuleiten und zu analysieren.			
<b>Inhalte:</b> Eine Auswahl aus den folgenden fortgeschrittenen Themen der Statistischen Physik: Nicht-Gleichgewichts-Thermodynamik (Entropieproduktion, Onsager-Relationen), Linear-Response- und Fluktuations-Dissipations-Theorem, Stochastische Prozesse (Markov-Prozesse, Mastergleichung, Langevin- und Fokker-Planck-Gleichung), Kinetische Theorie, Phasenübergänge (Landautheorie, Gauss-Fluktuationen, Korrelationsfunktionen, Renormierungsgruppen), Theorie der Flüssigkeiten, Hydrodynamik und Elastizitätslehre, Statistische Quantenmechanik, exakt lösbare Modelle.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten); die Modulprüfung wird nicht differenziert bewertet.	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Einführung in die Quantenmechanik			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten erlernen die grundlegenden mathematischen und methodischen Konzepte der Quantenmechanik eines Teilchens. Sie haben die Fähigkeit, die erworbenen Kenntnisse auf gegebene Probleme anzuwenden und diese zu lösen. Die Studentinnen und Studenten können die neue Denkweise in eigene Worte fassen und die grundlegenden Unterschiede zur klassischen Mechanik beschreiben. Darüber hinaus können die Studentinnen und Studenten beurteilen, für welche Probleme die Verwendung der Methoden der Quantenmechanik sinnvoll ist und welche Auswirkungen die Anwendung auf die Gültigkeit der klassischen Mechanik bedingt. Die Studentinnen und Studenten haben einen Überblick über die Historie der Quantenmechanik und einigen grundlegenden Experimenten. Sie sind mit der inhaltlichen Bedeutung der Quantenmechanik vertraut. Außerdem haben die Studentinnen und Studenten den notwendigen mathematischen Formalismus zur Darstellung und Berechnung der Probleme der Quantentheorie erlernt und können diesen anwenden.			
<b>Inhalte:</b> Mathematische Grundlagen und Formalismus, Schrödinger-Gleichung, eindimensionale Probleme, harmonischer Oszillator, Unschärferelation, Drehimpuls, Wasserstoffatom, Potenzialstreuung, Dichtematrix, Störungstheorie, grundlegende Experimente (z. B. Welle-Teilchen-Dualismus, Beugung und Interferenzeffekte, Schwarzkörperstrahlung, Photoeffekt, Stern-Gerlach-Versuch).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	5	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Präsenzzeit V 75 Vor- und Nachbereitung V 60
Übung	1		Präsenzzeit Ü 15 Vor- und Nachbereitung Ü 30 Schriftliche Übungsaufgaben 120
<b>Modulprüfung:</b>		Keine	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		300 Stunden	10 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

### 2. Bereich Scientific Computing

#### a) Informatik

Für die Beschreibung des Moduls „Complex Algorithms A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. b) Informatik

<b>Modul:</b> Complex Algorithms B
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten beherrschen grundlegende Kenntnisse der gängigen Entwurfstechniken für Algorithmen und können Algorithmen mit ihrer Hilfe entwerfen. Sie können Algorithmen in Bezug auf ihren Laufzeit- und Speicherbedarf analysieren und dabei auch fortgeschrittene Analysemethoden verwenden. Sie haben ein grundlegendes Verständnis der Theorie der NP-Vollständigkeit. Sie kennen die gängigen Komplexitätsklassen und können einfache Probleme in ihrer Komplexität einordnen. Sie vertiefen diese Fähigkeiten selbstständig in einem ausgewählten Themengebiet der höheren Informatik. Die Studentinnen und Studenten können Komplexere Algorithmen auf eines der folgenden Themen anwenden: Verteilte Systeme, Mustererkennung, Datenbanktechnologie oder Künstliche Intelligenz.
<b>Inhalte:</b> Es werden Aspekte folgender Themen behandelt: Wege- und Flussprobleme in Graphen, String-Matching, randomisierte Algorithmen, amortisierte Analyse, das „Master-Theorem“ zur Analyse von Teile-und-herrsche-Rekursionsgleichungen, NP-Vollständigkeit, Approximationsalgorithmen für schwere Probleme, zahlentheoretische Algorithmen (einschließlich RSA-Kryptosystem), Arithmetische Algorithmen und Schaltkreise sowie schnelle Fourier-Transformation. Diese werden anschließend vertieft. Es können folgenden Themen zusätzlich behandelt werden: <ul style="list-style-type: none"><li>– Verteilte Systeme, Verteilte Algorithmen, Verteilte Datenverwaltung, Suchverfahren für die Lösung kombinatorischer Aufgaben,</li><li>– Prädikatenlogik und ihre Mechanisierung, Resolution und Theorembeweise, wissensbasierte und Expertensysteme, Diffuse Logik,</li><li>– Baye'sche Verfahren der Mustererkennung, Clustering, Expectation-Maximization, Neuronale Netze und Lernalgorithmen, Assoziative Netze, Rekurrente Netze. Computer-Vision mit neuronalen Netzen,</li><li>– Datenbank-Zugriffstechniken und Anfrageoptimierung, Realisierung von Transaktionen, insbesondere Synchronisationsverfahren, die technische Maßnahmen, die Datenbanksysteme fehlertolerant machen. Verfahren zur effizienten Verwaltung andersartiger großer Datenbestände, insbesondere von XML-Dokumenten, korrekte Implementierung transaktionaler Garantien in Datenverwaltungssystemen.</li></ul>



Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## FU-Mitteilungen

Für die Beschreibung des Moduls „Computer Science and Data Structures A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. b) Informatik

<b>Modul:</b> Computer Science and Data Structures B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können objektorientierte Software entwickeln: sie beherrschen den Umgang mit Datenabstraktion, Vererbung und polymorphen Typsystemen und sind in der Lage, abstrakte Datentypen zu spezifizieren und zu implementieren, Korrektheitsbeweise für die Implementierungen abstrakter Datentypen durchzuführen und unter Einbeziehung von Effizienzanalysen eine Entscheidung über die jeweils zu wählende Datenrepräsentation zu treffen. Sie kennen die wichtigsten abstrakten Datentypen und ihre gängigen Implementierungen sowie die entsprechenden Schnittstellen und Klassen aus den Bibliotheken der verwendeten Programmiersprache,			
<b>Inhalte:</b> Ausgangspunkt ist das Geheimnisprinzip und seine Bedeutung für die Strukturierung von Programmen und die Konstruktion von Datenobjekten mittels Modulen und Klassen. Eine zentrale Rolle bei der Modellierung von Daten spielt der Begriff der Datenabstraktion, verbunden mit der Unterscheidung zwischen Spezifikation und Implementierung abstrakter Datenobjekte und Datentypen. Folgen, Mengen, Relationen, Bäume, Graphen und geometrische Objekte werden als abstrakte Typen eingeführt. Anschließend werden effizient manipulierbare Repräsentationen dieser Typen betrachtet und die zugehörigen Algorithmen auf ihre Komplexität hin untersucht.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Programmierprojekts	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

Für die Beschreibung des Moduls „Computer Science and Functional Programming A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. b) Informatik

<b>Modul:</b> Computer Science and Functional Programming B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten sind in der Lage, elementare Algorithmen funktional zu entwerfen, Anforderungen an funktionale Programme formal zu spezifizieren, gut strukturierte funktionale Programme zu entwickeln, funktionale Programme hinsichtlich ihres Aufwandes zu untersuchen und Eigenschaften funktionaler Programme formal zu beweisen. Sie haben ein grundlegendes Verständnis der Berechenbarkeit.			
<b>Inhalte:</b> Grundlagen der Berechenbarkeit (Lambda-Kalkül, primitive Rekursion, $\mu$ -Rekursion). Einführung in die Funktionale Programmierung (Syntax, primitive Datentypen, Listen, Tupel, Zeichenketten, Ausdrücke, Funktionsdefinitionen, Rekursion und Iteration, Funktionen höherer Ordnung, Polymorphie, Typsystem, Typherleitung und Überprüfung, Algebraische und abstrakte Datentypen, Ein- und Ausgabe, Such- und Sortieralgorithmen). Beweisen von Programmeigenschaften (Termersetzung, strukturelle Induktion, Terminierung). Implementierung und Programmier-technik (Auswertungsstrategien für funktionale Programme, modularer Programmentwurf).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Programmierprojekts	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## FU-Mitteilungen

Für die Beschreibung des Moduls „Computer Science and Object-Oriented Programming A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. b) Informatik

<b>Modul:</b> Computer Science and Object-oriented Programming B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten sind in der Lage, Algorithmen zustandsbezogen zu spezifizieren, gut strukturierte imperative Programme zu entwickeln, imperative Programme hinsichtlich ihrer Komplexität zu analysieren und Eigenschaften imperativer Programme formal zu beweisen.			
<b>Inhalte:</b> Grundlagen der Berechenbarkeit (universelle Registermaschinen, Syntax und operationelle Semantik imperativer Programmiersprachen), Formale Verfahren zur Spezifikation und Verifikation imperativer Programme (Bedingungen auf dem Zustandsraum, Hoare-Kalkül, partielle Korrektheit, Termination), Konzepte imperativer und objekt-orientierter Programmierung (primitive und zusammengesetzte Datentypen, Methoden, Parameterübergabe, Überladung, Module, Klassen, Objekte, Klassenhierarchien, Vererbung, abstrakte Klassen, Schnittstellen), Programmiermethodik (schrittweise korrekte Programmentwicklung, Teile und Herrsche, Backtracking, Analyse von Laufzeit und Speicherbedarf, O-Notation, Umwandlung von Rekursion in Iteration, Analyse von Such- und Sortieralgorithmen).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80
Übung	2	– schriftliche Bearbeitung der Übungsblätter – zwei mündliche Präsentationen der Lösung jeweils einer Übungsaufgabe in der Übung	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60 Schriftliche Übungsaufgaben 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Programmierprojekts	Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

b) Numerik

Für die Beschreibung des Moduls „Introduction to Numerical Mathematics A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. e) Mathematik

<b>Modul:</b> Introduction to Numerical Mathematics B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten beherrschen anspruchsvolle, numerische Lösungsverfahren für elementare Probleme der Algebra und gewöhnlicher Differenzialgleichungen. Sie haben ein Gespür für die mathematische Struktur dieser Probleme entwickelt und beherrschen die Auswahl und Entwicklung zuverlässiger und effizienter Lösungsverfahren. Im Rahmen eines Seminars haben die Studentinnen und Studenten das erlernte Wissen auf praktische Probleme des wissenschaftlichen Rechnens übertragen und einen Einblick in die mathematische Modellierung solcher Probleme bekommen.			
<b>Inhalte:</b> Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme, Choleskyzerlegung und QR-Zerlegung. Eigenwertprobleme. Bestapproximation. Interpolation durch Polynome und Splines, Gauß-Quadratur und adaptive Quadratur. Anfangswertprobleme für gewöhnliche Differenzialgleichungen			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## FU-Mitteilungen

Für die Beschreibung des Moduls „Numerics of ODEs and numerical linear algebra A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. e) Mathematik

<b>Modul:</b> Numerics of ODEs and numerical linear algebra B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten besitzen vertiefte Kenntnisse der numerischen Lösung von gewöhnlichen Differenzialgleichungen sowie der numerischen linearen Algebra und können sicher damit umgehen. Im Rahmen eines Seminars haben die Studentinnen und Studenten das erlernte Wissen auf praktische Probleme des wissenschaftlichen Rechnens übertragen und einen Einblick in die mathematische Modellierung solcher Probleme bekommen.			
<b>Inhalte:</b> Auswahl aus folgenden Themen: – Anfangswertprobleme für steife Differenzialgleichungen (Stabilität und asymptotische Stabilität, von Fixpunkten, Testgleichungen) – implizite Runge-Kutta-Verfahren (Vererbungsprinzip, Stabilitätsgebiete, A- und B-Stabilität, Gauß-Verfahren) – differenziell-algebraische Gleichungen (Grundbegriffe, Index) – Hamiltonsche Systeme (Energieerhaltung, Symplektizität, symplektische Runge-Kutta-Verfahren) – iterative Verfahren zur Lösung großer linearer Gleichungssysteme (Lineare Iterationsverfahren, Vorkonditionierung, Abstiegsverfahren, Verfahren der konjugierten Gradienten).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch oder Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

Für die Beschreibung des Moduls „Numerics of partial differential equations A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. e) Mathematik

<b>Modul:</b> Numerics of partial differential equations B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten besitzen vertiefte Kenntnisse der numerischen Lösung von partiellen Differenzialgleichungen sowie der numerischen linearen Algebra und können sicher damit umgehen. Im Rahmen eines Seminars haben die Studentinnen und Studenten das erlernte Wissen auf praktische Probleme des wissenschaftlichen Rechnens übertragen und einen Einblick in die mathematische Modellierung solcher Probleme bekommen.			
<b>Inhalte:</b> Auswahl aus folgenden Themen: – mathematische Modellierung mit partiellen Differenzialgleichungen – Klassifikation (elliptisch, parabolisch, hyperbolisch) und Wohlgestelltheit – klassische Lösungen und finite Differenzen (Maximumprinzip, Konsistenz, Konvergenz) – schwache Lösungen und finite Elemente (Sobolev-Räume, Fehlerabschätzungen, Teilraumkorrektur-Methoden) – parabolische Differenzialgleichungen (Linien- und Rothe-Methode).			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Deutsch oder Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## FU-Mitteilungen

c) Statistik

Für die Beschreibung des Moduls „Computational Statistical Physics I A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. g) Physik

<b>Modul:</b> Computational Statistical Physics I B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b>			
Die Studentinnen und Studenten sind in der Lage, die wichtigsten Konzepte und Sätze der statistischen Physik sowie Thermodynamik zu benennen und zu beschreiben. Weiterhin sind sie in der Lage, die erworbenen Methodenkenntnisse auf gegebene Probleme zu übertragen und diese zu lösen.			
Die Studentinnen und Studenten haben außerdem die für den Umgang mit der statistischen Physik und Thermodynamik notwendigen Rechenmethoden erlernt und sind in der Lage, diese anzuwenden.			
Die Studentinnen und Studenten können ihre Methodenkenntnisse und Rechenmethoden im Bereich der statistischen Physik auf komplexe Fragestellungen anwenden.			
<b>Inhalte:</b>			
Elementare Statistik und Gesetz großer Zahlen, Gleichgewichts-Ensembles, Prinzip der maximalen Entropie, Hauptsätze der Thermodynamik, thermodynamische Potentiale, thermodynamische Prozesse, Phasenübergänge, ideale Quantengase, wechselwirkende Systeme.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	



Für die Beschreibung des Moduls „Computational Statistical Physics II A“ siehe oben unter I. Synchronisierungsbereich, 2. Fachliche Angebote, Buchst. g) Physik

<b>Modul:</b> Computational Statistical Physics II B			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten haben vertiefte Kenntnisse über die Konzepte und Sätze der statistischen Physik. Sie können diese benennen, beschreiben und anwenden, die erworbenen Methodenkenntnisse auf gegebene Probleme übertragen und diese lösen. Die Studentinnen und Studenten haben ihre Methodenkenntnisse und Rechenmethoden im Bereich der statistischen Physik erweitert und sind nun in der Lage, diese auf komplexe Fragestellungen anzuwenden. Mit den erlernten Methoden sind Studentinnen und Studenten auch in der Lage, mikroskopische physikalische Prozesse/Gesetzmäßigkeiten auf makroskopischer Ebene abzuleiten und zu analysieren.			
<b>Inhalte:</b> Eine Auswahl aus den folgenden fortgeschrittenen Themen der Statistischen Physik: Nicht-Gleichgewichts-Thermodynamik (Entropieproduktion, Onsager-Relationen), Linear-Response- und Fluktuations-Dissipations-Theorem, Stochastische Prozesse (Markov-Prozesse, Mastergleichung, Langevin- und Fokker-Planck-Gleichung), Kinetische Theorie, Phasenübergänge (Landautheorie, Gauss-Fluktuationen, Korrelationsfunktionen, Renormierungsgruppen), Theorie der Flüssigkeiten, Hydrodynamik und Elastizitätslehre, Statistische Quantenmechanik, exakt lösbare Modelle.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	4	–	Präsenzzeit V 60 Vor- und Nachbereitung V 80 Präsenzzeit S 30
Übung	2	Erfolgreiches Bearbeiten von Übungsaufgaben	Vor- und Nachbereitung S 60 Präsenzzeit Ü 30 Vor- und Nachbereitung Ü 60
Seminar	2	Ausarbeitung und Präsentation eines Forschungsthemas oder Programmierprojekts	Schriftliche Übungsaufgaben 60 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 70
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		450 Stunden	15 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein oder zwei Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

## III. Spezialisierungsbereich

### 1. Molecular Sciences

#### Pflichtteil

<b>Modul:</b> Molecular simulation I			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik sowie Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten lernen die theoretischen Grundlagen und Simulationstechniken für einfache stochastische Systeme (z. B. Molekül-Modelle, Ising-Modelle, Diffusion in Modellpotenzialen) kennen. Sie verstehen die physikalischen Prinzipien und Zusammenhänge von stochastischen Trajektorien und Ensembles, sind in der Lage, geeignete Simulationsdaten zu generieren und daraus Erwartungswerte zu schätzen. Sie können Erlerntes sicher anwenden.			
<b>Inhalte:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>Thermostatik:</i> Grundlagen und Herleitungen zu den wichtigsten Ensembles. Boltzmannverteilung, Zustandssummen, Erwartungswerte.</li> <li>– <i>Monte-Carlo-Verfahren:</i> Theorie, Konstruktion, Konvergenz und Durchführung von Monte-Carlo Verfahren zur Berechnung stationärer Erwartungswerte.</li> <li>– <i>Kinetik:</i> Theorie zu Raten, Zeitkorrelationen und anderen zeitabhängigen Erwartungswerten.</li> <li>– <i>Molekulardynamik-Simulation:</i> Theorie, Konstruktion, Konvergenz und Durchführung von Molekulardynamik-Simulationen zur Berechnung zeitabhängiger Erwartungswerte.</li> </ul> <p>Die Veranstaltung ist komplementär zu Molecular Simulation II. Es wird die Reihenfolge Molecular Simulation I, Molecular Simulation II empfohlen, dies ist jedoch nicht zwingend nötig.</p>			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü 30
Übung	2	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter und mündliche Präsentation der Lösungen	Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

Für das Modul „Quantenchemie“ (5 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Chemie des Fachbereichs Biologie, Chemie und Pharmazie der Freien Universität Berlin verwiesen.

b) Wahlpflichtteil

Für das Modul „Dichtefunktionaltheorie“ (5 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Chemie des Fachbereichs Biologie, Chemie und Pharmazie der Freien Universität Berlin verwiesen.

<b>Modul:</b> Forschungsprojekt A			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können ihre Kenntnisse, Fähigkeiten und Fertigkeiten im wissenschaftlichen Rechnen in einem aktuellen, nach Möglichkeit industriebezogenen Forschungsprojekt einsetzen. Sie können im Team arbeiten und über ihre Arbeit geeignet kommunizieren. Sie sind dazu bereit, im Team bei Bedarf Hilfestellungen anzubieten, sie können einzusetzende Hilfsmittel auswählen und beurteilen und in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> In diesem Modul werden anwendungsorientierte Probleme mit Hilfsmitteln des wissenschaftlichen Rechnens bearbeitet.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Projektseminar	2	Diskussionsbeiträge	Präsenzzeit PS 30 Vor- und Nachbereitung PS 100 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 20
<b>Modulprüfung:</b>		Vortrag (ca. 15 Minuten) mit schriftlicher Ausarbeitung des eigenständigen Projektbeitrags (ca. 5 Seiten)	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	

## FU-Mitteilungen

<b>Modul:</b> Forschungsprojekt E									
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik									
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls									
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine									
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können ihre Kenntnisse, Fähigkeiten und Fertigkeiten im wissenschaftlichen Rechnen in einem aktuellen, nach Möglichkeit industriebezogenen Forschungsprojekt einsetzen. Sie können im Team arbeiten und über ihre Arbeit geeignet kommunizieren. Sie sind dazu bereit, im Team bei Bedarf Hilfestellungen anzubieten, sie können einzusetzende Hilfsmittel auswählen und beurteilen und in sachlicher Weise Kritik üben.									
<b>Inhalte:</b> In diesem Modul werden anwendungsorientierte Probleme mit Hilfsmitteln des wissenschaftlichen Rechnens bearbeitet.									
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)						
Projektseminar	4	Regelmäßige Diskussionsbeiträge	<table border="0"> <tr> <td>Präsenzzeit PS</td> <td>60</td> </tr> <tr> <td>Vor- und Nachbereitung PS</td> <td>210</td> </tr> <tr> <td>Prüfungsvorbereitung und Prüfung</td> <td>30</td> </tr> </table>	Präsenzzeit PS	60	Vor- und Nachbereitung PS	210	Prüfungsvorbereitung und Prüfung	30
Präsenzzeit PS	60								
Vor- und Nachbereitung PS	210								
Prüfungsvorbereitung und Prüfung	30								
<b>Modulprüfung:</b>		Vortrag (ca. 30 Minuten) mit schriftlicher Ausarbeitung des eigenständigen Projektbeitrags (ca. 10 Seiten)							
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch							
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen							
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		300 Stunden	10 LP						
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester							
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr							
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing							

<b>Modul:</b> Forschungsseminar computational sciences			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können sich in ein aktuelles Thema anhand von Spezialliteratur selbstständig einarbeiten, es aufbereiten und sich ergänzendes Hintergrundwissen aneignen. Sie können auch ein schwieriges Thema in einem Vortrag verständlich vermitteln. Sie können wesentliche Elemente gegenüber weniger wichtigen Elementen hervorheben und achten bewusst auf den Einsatz geeigneter Medien. Sie sind dazu bereit, bei Unklarheiten Fragen zu stellen, sie können sich an einer Diskussion über wissenschaftliche Fragen beteiligen und sie können in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> In diesem Seminar werden aktuelle Forschungsthemen behandelt. Dabei können sich die Studentinnen und Studenten auch auf ihre Masterarbeit vorbereiten.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Seminar	2	Regelmäßige Diskussionsbeiträge	Präsenzzeit S 30 Vor- und Nachbereitung S 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 90
<b>Modulprüfung:</b>		Vorstellung eines Forschungsprojekts oder Literaturthemas (ca. 45 Minuten)	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Unregelmäßig	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	

<b>Modul:</b> Markov modeling			
<b>Hochschule/Fachbereich:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten lernen theoretische Grundlagen zur Konformationsdynamik und zur Diskreten Beschreibung von raumkontinuierlichen Markovprozessen. Sie können Erlerntes mittels ausgewählter numerischer und rechnergestützter Verfahren sicher anwenden. Sie sind dazu bereit, bei Unklarheiten Fragen zu stellen, sie können sich an einer Diskussion über wissenschaftliche Fragen beteiligen und sie können in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>Markovketten:</i> Theorie zu Raum-Zeit-diskreten Markovketten. Irreduzibilität, Ergodizität, Reversibilität. Algorithmen zur Berechnung dieser Eigenschaften.</li> <li>– <i>Modell- und Fehlerschätzung:</i> Maximum-Likelihood-Verfahren zur Schätzung reversibler und nichtreversibler Markovketten. Bayes-Theorem. Samplingverfahren für reversible und nichtreversible Modelle. Lineare Fehlerperturbation.</li> <li>– <i>Simulation und Konvergenz:</i> Konvergenz von Schätzgrößen und Verbesserung der Konvergenz.</li> <li>– <i>Ensemble-Analyse:</i> Eigenwerte und Eigenvektoren der Übergangsmatrix, Korrelationsfunktionen. Messgrößen für molekulare Experimente.</li> <li>– <i>Trajektorien-Analyse:</i> Mean first passage times, Kommitoren, Transition Path Theory.</li> <li>– <i>Diskretisierung:</i> Approximation von kontinuierlichen Markovprozessen durch Markovketten. Approximationsfehler. Variationsprinzip.</li> </ul>			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü 30
Übung	2	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter und mündliche Präsentation der Lösungen	Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences	

<b>Modul:</b> Molecular simulation II									
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Mathematik und Informatik sowie Physik									
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls									
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine									
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten lernen klassische (nichtquantenmechanische) Modelle für Moleküle, insbesondere Makro- und Biomoleküle, kennen. Sie können Erlerntes sicher anwenden.									
<b>Inhalte:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>Energiefunktion:</i> Aufbau, Bedeutung und Parametrisierung von empirischen Energiefunktionen für die klassische Molekulardynamik.</li> <li>– <i>Algorithmen und Datenstrukturen:</i> Periodische Randbedingungen, Cutoff, Effiziente Nachbarsuche.</li> <li>– <i>Langreichweitige Wechselwirkungen:</i> Coulombsumme, Konvergenz, Poisson-Gleichung, Ewaldsumme, Particle-Mesh-Methoden.</li> <li>– <i>Solvatisierungsmethoden:</i> Explizit, Poisson-Boltzmann, Generalized Born.</li> <li>– <i>Dynamik:</i> Integratoren, Diskretisierungsfehler.</li> <li>– <i>Sampling-Verfahren:</i> Metastabilität, Replica-Exchange, Umbrella Sampling.</li> <li>– <i>Erwartungswerte:</i> Berechnung von Erwartungswerten aus molekularen Simulationen.</li> </ul> <p>Das Modul ist komplementär zu Molecular Simulation I. Es wird die Reihenfolge Molecular Simulation I, Molecular Simulation II empfohlen, dies ist jedoch nicht zwingend nötig.</p> <p>Die praktischen Fähigkeiten werden in einem Simulationspraktikum vermittelt. Dieses findet in der Regel als Blockveranstaltung in der vorlesungsfreien Zeit statt.</p>									
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)						
Vorlesung	2	Aktive Teilnahme und Diskussion	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 80%;">Präsenzzeit V</td> <td style="text-align: right;">30</td> </tr> <tr> <td>Vor- und Nachbereitung V</td> <td style="text-align: right;">30</td> </tr> <tr> <td>Präsenzzeit Ü</td> <td style="text-align: right;">30</td> </tr> </table>	Präsenzzeit V	30	Vor- und Nachbereitung V	30	Präsenzzeit Ü	30
Präsenzzeit V	30								
Vor- und Nachbereitung V	30								
Präsenzzeit Ü	30								
Übung (Block)	2	Erfolgreiche Bearbeitung von Simulations- und Programmieraufgaben	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 80%;">Vor- und Nachbereitung Ü</td> <td style="text-align: right;">30</td> </tr> <tr> <td>Prüfungsvorbereitung und Prüfung</td> <td style="text-align: right;">30</td> </tr> </table>	Vor- und Nachbereitung Ü	30	Prüfungsvorbereitung und Prüfung	30		
Vor- und Nachbereitung Ü	30								
Prüfungsvorbereitung und Prüfung	30								
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).							
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch							
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen							
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP						
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester/Block							
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Unregelmäßig							
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Computational Sciences							

Für die Module „Quantenchemie Korrelationsmethode“ (5 LP) und „Quantenreaktionsdynamik“ (5 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Chemie des Fachbereichs Biologie, Chemie und Pharmazie der Freien Universität Berlin verwiesen.

## FU-Mitteilungen

<b>Modul:</b> Selected topics in theoretical computational sciences			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten kennen Grundlagen eines ausgewählten Forschungsgebietes des wissenschaftlichen Rechnens und verstehen die zugehörigen Begriffe. Sie können Erlerntes sicher anwenden. Sie sind dazu bereit, bei Unklarheiten Fragen zu stellen, sie können sich an einer Diskussion über wissenschaftliche Fragen beteiligen und sie können in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> Das Modul gibt eine Einführung in ein ausgewähltes Forschungsgebiet des wissenschaftlichen Rechnens. Zusätzlich werden aktuelle Forschungsfragen berührt.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	2	–	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit Ü 30
Übung	2	Erfolgreiche Bearbeitung der Übungsblätter und mündliche Präsentation der Lösungen	Vor- und Nachbereitung Ü 30 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Übung: ja, Vorlesung: Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Unregelmäßig	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	



<b>Modul:</b> Selected topics in applied computational sciences			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten kennen Grundlagen eines ausgewählten Gebietes des wissenschaftlichen Rechnens und können Lösungen zu ausgewählten Problemen selbstständig erarbeiten. Sie sind dazu bereit, bei Unklarheiten Fragen zu stellen, sie können sich an einer Diskussion über wissenschaftliche Fragen beteiligen und sie können in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> Das Modul gibt einen Einblick in ein ausgewähltes Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens. Zusätzlich werden aktuelle Forschungsfragen und Anwendungsbereiche berührt.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Vorlesung	2	Aktive Beteiligung und ggf. Diskussion	Präsenzzeit V 30 Vor- und Nachbereitung V 30 Präsenzzeit SPC 15
Seminar am PC	1	Erfolgreiche Durchführung von Computerübungen	Vor- und Nachbereitung SPC 15 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 60
<b>Modulprüfung:</b>		Klausur (90 Minuten), die auch in Form einer elektronischen Prüfungsleistung durchgeführt werden kann, oder mündliche Prüfung (ca. 30 Minuten) oder Hausarbeit (ca. 15 Seiten).	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		150 Stunden	5 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Unregelmäßig	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	

## FU-Mitteilungen

### 2. Geosciences

#### a) Pflichtteil

Für die Module „Physik der Erde I“ (6 LP) und „Seismik II“ (6 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Geologische Wissenschaften des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

#### b) Wahlpflichtteil

Für das Modul „Dynamik der Erde“ (6 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Geologische Wissenschaften des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

<b>Modul:</b> Forschungsprojekt C			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können ihre Kenntnisse, Fähigkeiten und Fertigkeiten im wissenschaftlichen Rechnen in einem aktuellen, nach Möglichkeit industriebezogenen Forschungsprojekt einsetzen. Sie können im Team arbeiten und über ihre Arbeit geeignet kommunizieren. Sie sind dazu bereit, im Team bei Bedarf Hilfestellungen anzubieten, sie können einzusetzende Hilfsmittel auswählen und beurteilen und in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> In diesem Modul werden anwendungsorientierte Probleme mit Hilfsmitteln des wissenschaftlichen Rechnens bearbeitet.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Projektseminar	2	Regelmäßige Diskussionsbeiträge	Präsenzzeit PS 30 Vor- und Nachbereitung PS 120 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 60
<b>Modulprüfung:</b>		Vortrag (ca. 15 Minuten) mit schriftlicher Ausarbeitung des eigenständigen Projektbeitrags (ca. 5 Seiten)	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		210 Stunden	7 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	

Für die Beschreibung des Moduls „Forschungsseminar computational sciences“ (5 LP) siehe oben unter III. Spezialisierungsbereich, 1. Molecular Sciences, Buchst. b) Wahlpflichtteil.

Für die Beschreibung des Moduls „Forschungsprojekt A“ siehe oben unter III. Spezialisierungsbereich, 1. Molecular Sciences, Buchst. b) Wahlpflichtteil.

Für das Modul „Physik der Erde II“ (6 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Geologische Wissenschaften des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

Für die Beschreibung der Module „Selected topics in theoretical computational sciences“ (5 LP) und „Selected topics in applied computational sciences“ (5 LP) siehe oben unter III. Spezialisierungsbereich, 1. Molecular Sciences, Buchst. b) Wahlpflichtteil.

Für das Modul „Thermodynamik und Kinetik von geologischen Prozessen“ (6 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Geologische Wissenschaften des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

3. Atmospheric Sciences

a) Pflichtteil

Für das Modul „Wetter- und Klimadiagnose“ (6 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Meteorologie des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

b) Wahlpflichtteil

<b>Modul:</b> Forschungsprojekt B			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können ihre Kenntnisse, Fähigkeiten und Fertigkeiten im wissenschaftlichen Rechnen in einem aktuellen, nach Möglichkeit industriebezogenen Forschungsprojekt einsetzen. Sie können im Team arbeiten und über ihre Arbeit geeignet kommunizieren. Sie sind dazu bereit, im Team bei Bedarf Hilfestellungen anzubieten, sie können einzusetzende Hilfsmittel auswählen und beurteilen und in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> In diesem Modul werden anwendungsorientierte Probleme mit Hilfsmitteln des wissenschaftlichen Rechnens bearbeitet.			
Lehr- und Lernformen	Präsenzstudium (Semesterwochenstunden = SWS)	Formen aktiver Teilnahme	Arbeitsaufwand (Stunden)
Projektseminar	2	Regelmäßige Diskussionsbeiträge	Präsenzzeit PS 30 Vor- und Nachbereitung PS 130 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 20
<b>Modulprüfung:</b>		Vortrag (ca. 15 Minuten) mit schriftlicher Ausarbeitung des eigenständigen Projektbeitrags (ca. 5 Seiten)	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		180 Stunden	6 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	

<b>Ergänzungsmodul:</b> Forschungsprojekt D			
<b>Hochschule/Fachbereiche:</b> Freie Universität Berlin/Biologie, Chemie, Pharmazie/Geowissenschaften/Mathematik und Informatik/Physik			
<b>Verantwortliche/r:</b> Dozentinnen und Dozenten des Moduls			
<b>Zugangsvoraussetzungen:</b> Keine			
<b>Qualifikationsziele:</b> Die Studentinnen und Studenten können ihre Kenntnisse, Fähigkeiten und Fertigkeiten im wissenschaftlichen Rechnen in einem aktuellen, nach Möglichkeit industriebezogenen Forschungsprojekt einsetzen. Sie können im Team arbeiten und über ihre Arbeit geeignet kommunizieren. Sie sind dazu bereit, im Team bei Bedarf Hilfestellungen anzubieten, sie können einzusetzende Hilfsmittel auswählen und beurteilen und in sachlicher Weise Kritik üben.			
<b>Inhalte:</b> In diesem Modul werden anwendungsorientierte Probleme mit Hilfsmitteln des wissenschaftlichen Rechnens bearbeitet.			
<b>Lehr- und Lernformen</b>	<b>Präsenzstudium</b> (Semesterwochenstunden = SWS)	<b>Formen aktiver Teilnahme</b>	<b>Arbeitsaufwand</b> (Stunden)
Projektseminar	4	Regelmäßige Diskussionsbeiträge	Präsenzzeit PS 60 Vor- und Nachbereitung PS 180 Prüfungsvorbereitung und Prüfung 30
<b>Modulprüfung:</b>		Vortrag (ca. 20 Minuten) mit schriftlicher Ausarbeitung des eigenständigen Projektbeitrags (ca. 5 Seiten)	
<b>Veranstaltungssprache:</b>		Englisch	
<b>Pflicht zur regelmäßigen Teilnahme:</b>		Teilnahme wird empfohlen	
<b>Arbeitszeitaufwand insgesamt:</b>		270 Stunden	9 LP
<b>Dauer des Moduls:</b>		Ein Semester	
<b>Häufigkeit des Angebots:</b>		Mindestens einmal im Studienjahr	
<b>Verwendbarkeit:</b>		Masterstudiengang Scientific Computing	

Für die Beschreibung des Moduls „Forschungsseminar computational sciences“ (5 LP) siehe oben unter III. Spezialisierungsbereich, 1. Molecular Sciences, Buchst. b) Wahlpflichtteil.

Für die Module „Klimavariabilität und -modelle“ (8 LP), „Modelle für Wetter und Umwelt“ (8 LP), „Satellitenmeteorologie“ (8 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Meteorologie des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

Für die Beschreibung der Module „Selected topics in theoretical computational sciences“ (5 LP) und „Selected topics in applied computational sciences“ (5 LP) siehe oben unter III. Spezialisierungsbereich, 1. Molecular Sciences, Buchst. b) Wahlpflichtteil.

Für die Module „Theoretische Meteorologie I“ (8 LP) und „Theoretische Meteorologie II“ (8 LP) wird auf die Studien- und Prüfungsordnung für den Masterstudiengang Meteorologie des Fachbereichs Geowissenschaften der Freien Universität Berlin verwiesen.

Anlage 2: Exemplarischer Studienverlaufsplan

Variante A

1. Semester	2. Semester	3. Semester	4. Semester
Synchronisierungsbereich Pflichtmodul Computational Sciences (15 LP)	Bereich Scientific Computing Modul A (15 LP)	Spezialisierungsbereich 30 LP	<b>Masterarbeit mit begleitendem Kolloquium 30 LP</b>
Synchronisierungsbereich Wahlmodul/e im Umfang von insgesamt 15 LP	Bereich Scientific Computing Modul B (15 LP)		
<b>insgesamt 30 LP</b>	<b>insgesamt 30 LP</b>	<b>insgesamt 30 LP</b>	<b>insgesamt 30 LP</b>

Variante B

1. Semester	2. Semester	3. Semester	4. Semester
Synchronisierungsbereich Pflichtmodul Computational Sciences (15 LP)	Bereich Scientific Computing Modul A (15 LP)	Spezialisierungsbereich 30 LP	<b>Masterarbeit mit begleitendem Kolloquium 30 LP</b>
Bereich Scientific Computing Modul B (15 LP)			
Synchronisierungsbereich Wahlmodul/e im Umfang von insgesamt 15 LP			
<b>insgesamt 30 LP</b>	<b>insgesamt 30 LP</b>	<b>insgesamt 30 LP</b>	<b>insgesamt 30 LP</b>

**Anlage 3: Zeugnis (Muster)**



Gemeinsame Kommission  
der Fachbereiche Biologie, Chemie, Pharmazie, Geowissenschaften, Mathematik und Informatik sowie Physik der Freien Universität Berlin

Zeugnis

**Frau/Herr [Vorname/Name]**

geboren am [Tag/Monat/Jahr] in [Geburtsort]

hat den Masterstudiengang

**Computational Sciences**

auf der Grundlage der Prüfungsordnung vom 21. Januar 2016 (FU-Mitteilungen 13/2016) mit der Gesamtnote

**[Note als Zahl und Text]**

erfolgreich abgeschlossen und die erforderliche Zahl von 120 Leistungspunkten nachgewiesen.

Die Prüfungsleistungen wurden wie folgt bewertet:

Studienbereiche	Leistungspunkte	Note
Synchronisierungsbereich	30 (15)	n,n
Bereich Scientific Computing	30 (15)	n,n
Spezialisierungsbereich [XX]	30 (30)	n,n
Masterarbeit	30 (30)	n,n

Die Masterarbeit hatte das Thema: [XX]

Berlin, den [Tag/Monat/Jahr]

(Siegel)

Die/Der Vorsitzende  
der Gemeinsamen Kommission

Die/Der Vorsitzende  
des Prüfungsausschusses

Notenskala: 1,0 – 1,5 sehr gut; 1,6 – 2,5 gut; 2,6 – 3,5 befriedigend; 3,6 – 4,0 ausreichend; 4,1 – 5,0 nicht ausreichend

Undifferenzierte Bewertungen: BE – bestanden; NB – nicht bestanden

Die Leistungspunkte entsprechen dem European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS).

Ein Teil der Leistungen ist unbenotet; die in Klammern gesetzte Leistungspunktzahl benennt den Umfang der mit einer Note differenziert bewerteten Leistungen, die die Gesamtnote beeinflussen.

Anlage 4: Urkunde (Muster)



Gemeinsame Kommission  
der Fachbereiche Biologie, Chemie, Pharmazie, Geowissenschaften, Mathematik und Informatik  
sowie Physik der Freien Universität Berlin

Urkunde

**Frau/Herr [Vorname/Name]**

geboren am [Tag/Monat/Jahr] in [Geburtsort]

hat den Masterstudiengang

**Computational Sciences**

erfolgreich abgeschlossen.

Gemäß der Prüfungsordnung vom 21. Januar 2016 (FU-Mitteilungen 13/2016)

wird der Hochschulgrad

**Master of Science (M. Sc.)**

verliehen.

Berlin, den [Tag/Monat/Jahr]

(Siegel)

Die/Der Vorsitzende  
der Gemeinsamen Kommission

Die/Der Vorsitzende  
des Prüfungsausschusses