

# Curriculum für das Masterstudium Computational Science

Stand: Juni 2016

Mitteilungsblatt UG 2002 vom 15.05.2013, 25. Stück, Nummer 150

1. (geringfügige) Änderung Mitteilungsblatt UG 2002 vom 02.02.2016, 13. Stück, Nummer 78

Rechtsverbindlich sind allein die im Mitteilungsblatt der Universität Wien kundgemachten Texte.

## § 1 Studienziele und Qualifikationsprofil

(1) Das Ziel des Masterstudiums Computational Science an der Universität Wien ist es, fächerübergreifende Kenntnisse in den computerorientierten Teilgebieten der Fächer Mathematik, Informatik, Astronomie, Physik, Chemie und Biologie zu erwerben. Darauf aufbauend ist eine Schwerpunktsetzung in einem der sechs Fächer möglich.

(2) Die Absolventinnen und Absolventen des Masterstudiums Computational Science an der Universität Wien erwerben zwar zu Beginn das theoretische Rüstzeug in den einzelnen Fächern, aber das Ausbildungsziel ist ein interdisziplinäres: Ausgehend von einer fachspezifischen Fragestellung soll durch den Einsatz entsprechender naturwissenschaftlicher und mathematisch-informatischer Werkzeuge das vorliegende, fachspezifische Problem in einen Computeralgorithmus übersetzt werden. Diese methodische Vorgangsweise ermöglicht es, durch entsprechende „Computerexperimente“ die Komplexität moderner Fragestellungen in all ihren Teilaspekten zu analysieren und den Einfluss der Systemparameter auf die Ergebnisse umfassend darzustellen. Dadurch wird ein Ausbildungszustand erreicht, welcher über die Expertise eines Teams von Spezialisten hinausgeht. Von den Absolventen werden gleichzeitig solide Grundkenntnisse in den einzelnen Fächern sowie die Beherrschung der theoretischen Grundlagen und deren Übersetzung in den computersprachlichen Kontext gefordert. Dadurch erfährt die im Bachelorstudium erworbene fachspezifische Kompetenz eine Verbreiterung, welche der heutzutage immer öfter geforderten Interdisziplinarität Rechnung trägt und deshalb einen entsprechenden beruflichen Vorteil bietet.

(3) „Computational Science“ ist ein Gebiet, in dem bestimmte englische Fachausdrücke sehr genaue Bezeichnungen sind, welche sich aber schwer in die deutsche Sprache übertragen lassen. Allein schon das Wort „Computational“ ist ein solches. Im Sinne der Klarheit werden daher im Folgenden derartige Fachausdrücke gemeinsam mit deutschen Begriffen verwendet. Die Titel der Lehrveranstaltungen sind einheitlich in Englisch. Dadurch scheint die deutsche Bezeichnung für Informatik als „Computer Science“ auf. Dieser Fachausdruck bleibt aber auf die Titel der Lehrveranstaltungen beschränkt, damit es nicht zu Verwechslungen mit dem Namen des gesamten Studiums kommt.

## § 2 Dauer und Umfang

(1) Der Arbeitsaufwand für das Masterstudium Computational Science beträgt 120 ECTS-Punkte. Das entspricht einer vorgesehenen Studiendauer von vier Semestern.

(2) Das Studium ist abgeschlossen, wenn 90 ECTS-Punkte gemäß den Bestimmungen in den Pflichtmodulen, Alternativen Pflichtmodulen bzw. Wahlmodulen, 27 ECTS-Punkte gemäß den Bestimmungen über die Masterarbeit und 3 ECTS-Punkte gemäß den Bestimmungen über die Masterprüfung positiv absolviert wurden.

## § 3 Zulassungsvoraussetzungen

Die Zulassung zum Masterstudium Computational Science setzt den Abschluss eines fachlich in Frage kommenden Bachelorstudiums oder eines fachlich in Frage kommenden Fachhochschul-Bachelorstudienganges oder eines anderen gleichwertigen Studiums an einer anerkannten inländischen oder ausländischen postsekundären Bildungseinrichtung voraus.

Fachlich in Frage kommend sind jedenfalls die Bachelorstudien Mathematik, Informatik, Astronomie, Erdwissenschaften, Physik, Chemie und Biologie an der Universität Wien.

Wenn die Gleichwertigkeit grundsätzlich gegeben ist, und nur einzelne Ergänzungen auf die volle Gleichwertigkeit fehlen, können zur Erlangung der vollen Gleichwertigkeit zusätzliche Lehrveranstaltungen und Prüfungen im Ausmaß von maximal 30 ECTS-Punkten vorgeschrieben werden, die im Verlauf des Masterstudiums zu absolvieren sind.

## § 4 Akademischer Grad

Absolventinnen bzw. Absolventen des Masterstudiums Computational Science ist der akademische Grad „*Master of Science*“ – abgekürzt *MSc* – zu verleihen. Im Falle der Führung ist dieser akademische Grad dem Namen nachzustellen.

## § 5 Aufbau – Module mit ECTS-Punktezuweisung

### (1) Überblick

Das Studium gliedert sich in vier Teile: Das CORE-Programm (42 ECTS), das SHELL-Programm (48 ECTS), die Masterarbeit (27 ECTS) und die Masterprüfung (3 ECTS).

Das SHELL-Programm besteht aus einem Schwerpunktsmodul (24 ECTS) und einem Ergänzungsmodul (24 ECTS). Im Gegensatz zum CORE-Programm, dessen LVA neu geschaffen werden, werden die LVA des SHELL-Programms aus den Computerorientierten LVA der sechs Fächer Mathematik, Informatik, Astronomie, Physik, Chemie und Biologie abgedeckt. Diese können durch nicht absolvierte LVA und Module des CORE-Programms ergänzt werden.

Je nach Vorbildung sind unterschiedliche Module bzw. Modulgruppen zu absolvieren:

#### a) Für AbsolventInnen eines Naturwissenschaftlichen Bachelorstudiums:

- Aus dem CORE-Programm sind folgende Module bzw. Modulgruppen zu absolvieren:

<b>PM- CCNW1</b>	<b>Pflichtmodul</b>	<b>12 ECTS</b>
	<b>Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1</b>	
CO-AST1	Computational Concepts in Astronomy and Geosciences I, VO	3
CO-PHY1	Computational Concepts in Physics I, VO	3
CO-CHE1	Computational Concepts in Chemistry I, VO	3
CO-BIO1	Computational Concepts in Biology I, VO	3

Für AbsolventInnen eines Naturwissenschaftlichen Bachelorstudiums ist aus den Alternativen Pflichtmodulgruppen 2a, 2b und 2c (APMG) die Alternative Pflichtmodulgruppe 2a zu wählen:

<b>APMG 2a</b>	<b>Basic Courses in Mathematics and Computer Science</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT1	Introductory Courses in Mathematics I	6
CO-MAT2	Introductory Courses in Mathematics II	6
CO-INF1	Introductory Courses in Computer Science	6

<b>APMG 2b</b>	<b>Advanced Courses in Mathematics and Computer Science</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6
CO-INF2	Advanced Courses in Computer Science I	6
CO-INF3	Advanced Courses in Computer Science II	6

<b>APMG 2c</b>	<b>Basic and Advanced Courses in Mathematics</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT1	Introductory Courses in Mathematics I	6
CO-MAT2	Introductory Courses in Mathematics II	6
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6

**AbsolventInnen eines Naturwissenschaftlichen Bachelorstudiums wählen überdies Module im Gesamtausmaß von 12 ECTS-Punkten aus einer Wahlmodulgruppe:**

<b>WMG MAT-INF-CCNW2</b>	<b>Wahlmodulgruppe</b> Mathematik, Informatik, Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 2	<b>12 ECTS</b>
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6
CO-INF2	Advanced Courses in Computer Science I	6
CO-INF3	Advanced Courses in Computer Science II	6
CO-AST2	Computational Concepts in Astronomy and Geosciences II	3
CO-PHY2	Computational Concepts in Physics II	3
CO-CHE2	Computational Concepts in Chemistry II	3
CO-BIO2	Computational Concepts in Biology II	3

**- Aus dem SHELL-Programm sind folgende Module zu absolvieren:**

**Pflichtmodul Shell-Schwerpunkt (24 ECTS):**

- Schwerpunktsfach Mathematik
- Schwerpunktsfach Informatik
- Schwerpunktsfach Astronomie
- Schwerpunktsfach Physik
- Schwerpunktsfach Chemie
- Schwerpunktsfach Biologie

**Pflichtmodul Shell-Ergänzung (24 ECTS):**

Dieser Modul muss LVA aus mindestens drei der oben genannten sechs Fächer umfassen, welche nicht mit dem Schwerpunktsfach identisch sein dürfen.

**- Überdies zu absolvieren sind:**

**Masterarbeit (27 ECTS)**  
**Defensio (3 ECTS)**

**b) Für AbsolventInnen des Bachelorstudiums Mathematik:**

**- Aus dem CORE-Programm sind folgende Module bzw. Modulgruppen zu absolvieren:**

<b>PM- CCNW1</b>	<b>Pflichtmodul</b>  <b>Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1</b>	<b>12 ECTS</b>
CO-AST1	Computational Concepts in Astronomy and Geosciences I, VO	3
CO-PHY1	Computational Concepts in Physics I, VO	3
CO-CHE1	Computational Concepts in Chemistry I, VO	3
CO-BIO1	Computational Concepts in Biology I, VO	3

**Für AbsolventInnen des Bachelorstudiums Mathematik ist aus den Alternativen Pflichtmodulgruppen 2a, 2b und 2c (APMG) die Alternative Pflichtmodulgruppe 2b zu wählen:**

<b>APMG 2a</b>	<b>Basic Courses in Mathematics and Computer Science</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT1	Introductory Courses in Mathematics I	6
CO-MAT2	Introductory Courses in Mathematics II	6
CO-INF1	Introductory Courses in Computer Science	6

<b>APMG 2b</b>	<b>Advanced Courses in Mathematics and Computer Science</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6
CO-INF2	Advanced Courses in Computer Science I	6
CO-INF3	Advanced Courses in Computer Science II	6

<b>APMG 2c</b>	<b>Basic and Advanced Courses in Mathematics</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT1	Introductory Courses in Mathematics I	6
CO-MAT2	Introductory Courses in Mathematics II	6
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6

**AbsolventInnen des Bachelorstudiums Mathematik haben überdies eine Pflichtmodulgruppe im Gesamtausmaß von 12 ECTS-Punkten zu absolvieren:**

<b>PMG- CCNW2</b>	<b>Pflichtmodulgruppe</b>  <b>Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 2</b>	<b>12 ECTS</b>
CO-AST2	Computational Concepts in Astronomy and Geosciences II	3
CO-PHY2	Computational Concepts in Physics II	3
CO-CHE2	Computational Concepts in Chemistry II	3
CO-BIO2	Computational Concepts in Biology II	3

**- Aus dem SHELL-Programm sind folgende Module zu absolvieren:**

**Pflichtmodul Shell-Schwerpunkt (24 ECTS):**

- Schwerpunktsfach Mathematik
- Schwerpunktsfach Informatik
- Schwerpunktsfach Astronomie
- Schwerpunktsfach Physik
- Schwerpunktsfach Chemie
- Schwerpunktsfach Biologie

**Pflichtmodul Shell-Ergänzung (24 ECTS):**

Dieser Modul muss LVA aus mindestens drei der oben genannten sechs Fächer umfassen, welche nicht mit dem Schwerpunktsfach identisch sein dürfen.

- **Überdies zu absolvieren sind:**

**Masterarbeit (27 ECTS)**

**Defensio (3 ECTS)**

**c) Für AbsolventInnen des Bachelorstudiums Informatik:**

- **Aus dem CORE-Programm sind folgende Module bzw. Modulgruppen zu absolvieren:**

<b>PM- CCNW1</b>	<b>Pflichtmodul</b> <b>Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1</b>	<b>12 ECTS</b>
CO-AST1	Computational Concepts in Astronomy and Geosciences I, VO	3
CO-PHY1	Computational Concepts in Physics I, VO	3
CO-CHE1	Computational Concepts in Chemistry I, VO	3
CO-BIO1	Computational Concepts in Biology I, VO	3

**Für AbsolventInnen des Bachelorstudiums Informatik ist aus den Alternativen Pflichtmodulgruppen 2a, 2b und 2c (APMG) die Alternative Pflichtmodulgruppe 2c zu wählen:**

<b>APMG 2a</b>	<b>Basic Courses in Mathematics and Computer Science</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT1	Introductory Courses in Mathematics I	6
CO-MAT2	Introductory Courses in Mathematics II	6
CO-INF1	Introductory Courses in Computer Science	6

<b>APMG 2b</b>	<b>Advanced Courses in Mathematics and Computer Science</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6
CO-INF2	Advanced Courses in Computer Science I	6
CO-INF3	Advanced Courses in Computer Science II	6

<b>APMG 2c</b>	<b>Basic and Advanced Courses in Mathematics</b>	<b>18 ECTS</b>
CO-MAT1	Introductory Courses in Mathematics I	6
CO-MAT2	Introductory Courses in Mathematics II	6
CO-MAT3	Advanced Courses in Mathematics	6

**AbsolventInnen des Bachelorstudiums Informatik haben überdies eine Pflichtmodulgruppe im Gesamtausmaß von 12 ECTS-Punkten zu absolvieren:**

<b>PMG- CCNW2</b>	<b>Pflichtmodulgruppe</b> <b>Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 2</b>	<b>12 ECTS</b>
CO-AST2	Computational Concepts in Astronomy and Geosciences II	3
CO-PHY2	Computational Concepts in Physics II	3

CO-CHE2	Computational Concepts in Chemistry II	3
CO-BIO2	Computational Concepts in Biology II	3

- Aus dem SHELL-Programm sind folgende Module zu absolvieren:

<p><b>Pflichtmodul Shell-Schwerpunkt (24 ECTS):</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Schwerpunktsfach Mathematik</li> <li>- Schwerpunktsfach Informatik</li> <li>- Schwerpunktsfach Astronomie</li> <li>- Schwerpunktsfach Physik</li> <li>- Schwerpunktsfach Chemie</li> <li>- Schwerpunktsfach Biologie</li> </ul>
<p><b>Pflichtmodul Shell-Ergänzung (24 ECTS):</b>                  Dieser Modul muss LVA aus mindestens drei der oben genannten sechs Fächer umfassen, welche nicht mit dem Schwerpunktsfach identisch sein dürfen.</p>

- Überdies zu absolvieren sind:

<p><b>Masterarbeit (27 ECTS)</b>  <b>Defensio (3 ECTS)</b></p>
--

**(2) Modulbeschreibungen**

<b>PM-CCNW 1</b>	<b>Pflichtmodul Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1</b>	<b>12 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung grundlegender computerorientierter Konzepte in den naturwissenschaftlichen Disziplinen Astronomie, Physik, Chemie und Biologie.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Computational Concepts in Astronomy and Geosciences I (CO-AST1), 3 ECTS, 2 SSt (npi) VO Computational Concepts in Physics I (CO-PHY1), 3 ECTS, 2 SSt (npi) VO Computational Concepts in Chemistry I (CO-CHE1), 3 ECTS, 2 SSt (npi) VO Computational Concepts in Biology I (CO-BIO1), 3 ECTS, 2 SSt (npi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 12 ECTS	

<i>CO-MAT1</i>	<b>Introductory Courses in Mathematics I</b>	<b>6 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	keine	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung grundlegender Kenntnisse der numerischen Mathematik und Statistik, wie sie in der Modellierung naturwissenschaftlicher Probleme und deren computerunterstützter Lösung benötigt werden.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Numerische Methoden I, 4 ECTS, 3 SSt (npi) UE Übungen zu Numerische Methoden I, 2 ECTS, 1 SSt (pi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 6 ECTS	

<i>CO-MAT2</i>	<b>Introductory Courses in Mathematics II</b>	<b>6 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	keine	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung weiterführender Kenntnisse der numerischen Mathematik und Statistik, wie sie in der Modellierung naturwissenschaftlicher Probleme und deren computerunterstützter Lösung benötigt werden.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Numerische Methoden II, 4 ECTS, 3 SSt (npi),  UE Übungen zu Numerische Methoden II, 2 ECTS, 1 SSt (pi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 6 ECTS	

<i>CO-INF1</i>	<b>Introductory Courses in Computer Science</b>	<b>6 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	keine	
<b>Modulziele</b>	Einführen ins Programmieren, Theorie der Programmiersprache, software engineering und software architecture. Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Programming Languages and Software Engineering, 3ECTS, 2 SSt (npi) UE Uebungen zu Programming Languages and Software Engineering, 3 ECTS, 2 SSt (pi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 6 ECTS	

<i>CO-AST2</i>	<b>Computational Concepts in Astronomy and Geosciences II</b>	<b>3 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Optional: Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-AST1</i>	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung fortgeschrittener Kenntnisse im Bereich astrophysikalischer Simulationen  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Computational Concepts in Astronomy and Geosciences II, 3 ECTS, 2 SSt (npi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 3 ECTS	

<i>CO-PHY2</i>	<b>Computational Concepts in Physics II</b>	<b>3 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Optional: Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-PHY1</i>	
<b>Modulziele</b>	Einführung in die Probleme der Computational Physics, im Besonderen der Thermodynamik und statistischen Mechanik.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Computational Concepts in Physics II, 3 ECTS, 2 SSt (npi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 3 ECTS	

<i>CO-CHE2</i>	<b>Computational Concepts in Chemistry II</b>	<b>3 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Optional: Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-CHE1</i>	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung von Kenntnissen zur Berechnung von Molekülen auf dem coarse-grained und discrete Level  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Computational Concepts in Chemistry II, 3 ECTS, 2 SSt (npi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 3 ECTS	

<i>CO-BIO2</i>	<b>Computational Concepts in Biology II</b>	<b>3 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	keine	
<b>Optional: Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-BIO1</i>	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung von Kenntnissen im Bereich Functional Genomics, biologischer Netzwerke sowie von Organismen und Ökosystemen.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Computational Concepts in Biology II, 3 ECTS, 2 SSt (npi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 3 ECTS	

<i>CO-MAT3</i>	<b>Advanced Courses in Mathematics</b>	<b>6 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	keine	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung fortgeschrittener Kenntnisse der numerischen Mathematik, wie sie in der Modellierung naturwissenschaftlicher Probleme und deren computerunterstützter Lösung benötigt werden.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Numerische Methoden III – Optimierung, 3 ECTS, 2 SSt (npi)	



	VO Numerische Methoden IV - Partielle Differentialgleichungen, 3 ECTS), 2 SSt (npi)
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 6 ECTS

<i>CO-INF2</i>	<b>Advanced Courses in Computer Science I</b>	<b>6 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Optional: Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-INF1</i>	
<b>Modulziele</b>	Vermittlung grundlegender Kenntnisse in der Organisation logischer Daten, Modellierung von Konzepten, Management von Datenströmen, Machine Learning und Datenvisualisierung.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VO Databases and Processing of Large Data Sets, 3 ECTS, 2 SSt (npi) UE Übungen zu Databases and Processing of Large Data Sets, 3 ECTS, 2 SSt (pi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 6 ECTS	

<i>CO-INF3</i>	<b>Advanced Courses in Computer Science II</b>	<b>6 ECTS</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Optional: Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-INF1</i>	
<b>Modulziele</b>	Einführung in die Computerarchitektur und das Hochleistungsrechnen. Analyse und Design von Algorithmen.  Weitere nähere Ausführungen zu den Inhalten befinden sich im Anhang III.	
<b>Modulstruktur</b>	VU Computer Architecture and High Performance Computing, 3 ECTS, 2 SSt (pi) VU Algorithms and Data Structures, 3 ECTS, 2 SSt (pi)	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 6 ECTS	

<b>PM S-SP</b>	<b>Pflichtmodul Shell-Schwerpunkt</b>	<b>24 ECTS-Punkte</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	Keine	
<b>Modulziele</b>	Studierende vertiefen ihre Kenntnisse in einem der folgenden sechs Schwerpunkte:  Schwerpunktfach Mathematik Schwerpunktfach Informatik Schwerpunktfach Astronomie Schwerpunktfach Physik Schwerpunktfach Chemie Schwerpunktfach Biologie	

<b>Modulstruktur</b>	<p>Zu wählen sind Lehrveranstaltungen, die eine Schwerpunktsetzung des/der Studierenden in einem der sechs Fächer Mathematik, Informatik, Astronomie, Physik, Chemie und Biologie ermöglichen. Überdies dürfen keine Lehrveranstaltungen gewählt werden, die schon im vorangegangenen Bachelorstudium absolviert wurden. Die individuelle Modul-Zusammenstellung des/der Studierenden ist dem studienrechtlich zuständigen Organ vorzulegen und muss durch dieses vorab genehmigt werden. Die Lehrveranstaltungen sind aus der im Anhang II beispielhaft angeführten Liste auszuwählen. Die aktuell für dieses Modul in Frage kommenden Lehrveranstaltungen werden im Vorlesungsverzeichnis angegeben.</p> <p>Je nach (genehmigter) Wahl des/der Studierenden, nicht-prüfungsimmanente oder prüfungsimmanente Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 24 ECTS.</p>
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 24 ECTS.

<b>PM S-E</b>	<b>Pflichtmodul Shell-Ergänzung</b>	<b>24 ECTS-Punkte</b>
<b>Teilnahmevoraussetzung</b>	keine	
<b>Modulziele</b>	<p>Die Studierenden können ihre Fähigkeiten in folgenden sechs Fächern ergänzend zum Schwerpunktsfach vertiefen:</p> <p>Mathematik                      Informatik                      Astronomie                      Physik                      Chemie                      Biologie</p>	
<b>Modulstruktur</b>	<p>Zu wählen sind Lehrveranstaltungen im Ausmaß von jeweils 6-10 ECTS, die mindestens drei der oben genannten Fächer, welche nicht mit dem in Modul PM S-SP gewählten Schwerpunktsfach identisch sein dürfen, abdecken. Überdies dürfen keine Lehrveranstaltungen gewählt werden, die schon im vorangegangenen Bachelorstudium absolviert wurden. Die individuelle Modul-Zusammenstellung des/der Studierenden ist dem studienrechtlich zuständigen Organ vorzulegen und muss durch dieses vorab genehmigt werden. Die Lehrveranstaltungen sind aus der im Anhang II beispielhaft angeführten Liste auszuwählen. Die aktuell für dieses Modul in Frage kommenden Lehrveranstaltungen werden im Vorlesungsverzeichnis angegeben.</p> <p>Je nach (genehmigter) Wahl des/der Studierenden, nicht-prüfungsimmanente oder prüfungsimmanente Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 24 ECTS.</p>	
<b>Leistungsnachweis</b>	Positiver Abschluss aller Lehrveranstaltungen im Gesamtausmaß von 24 ECTS.	

## § 6 Masterarbeit

(1) Die Masterarbeit dient dem Nachweis der Befähigung, wissenschaftliche Themen selbständig sowie inhaltlich und methodisch vertretbar zu bearbeiten. Die Aufgabenstellung der Masterarbeit ist so zu wählen, dass für die Studierende oder den Studierenden die Bearbeitung innerhalb von sechs Monaten möglich und zumutbar ist.

(2) Das Thema der Masterarbeit ist aus einem der Pflicht- bzw. Alternativen Pflichtmodule zu entnehmen. Soll ein anderer Gegenstand gewählt werden oder bestehen bezüglich der Zuordnung des gewählten Themas Unklarheiten, liegt die Entscheidung über die Zulässigkeit beim studienrechtlich zuständigen Organ.

(3) Die Masterarbeit hat einen Umfang von 27 ECTS-Punkten.

## **§ 7 Masterprüfung**

(1) Voraussetzung für die Zulassung zur Masterprüfung ist die positive Absolvierung aller vorgeschriebenen Module und Prüfungen sowie die positive Beurteilung der Masterarbeit.

(2) Die Masterprüfung ist eine Defensio. Sie besteht aus der Verteidigung der Masterarbeit und einer Prüfung über deren wissenschaftliches Umfeld. Die Beurteilung erfolgt gemäß den Bestimmungen der Satzung.

(3) Die Masterprüfung hat einen Umfang von 3 ECTS-Punkten.

## **§ 8 Einteilung der Lehrveranstaltungen**

(1) Im Rahmen des Studiums werden folgende nicht-prüfungsimmanente (npi) Lehrveranstaltungen abgehalten:

Vorlesung (VO), npi: Vorlesungen dienen der Darstellung von Themen, Gegenständen und Methoden des Studiums Computational Science. Die Vorlesung wird mit einer mündlichen oder schriftlichen Prüfung abgeschlossen.

(2) Folgende prüfungsimmanente (pi) Lehrveranstaltungen werden angeboten:

Übung (UE), pi: Sie dienen der Lösung konkreter Aufgaben und vertiefen so das in den Vorlesungen erworbene Wissen. Eine Beurteilung erfolgt durch aktive Mitarbeit, und – wenn verlangt – ein Referat und/oder die Anfertigung einer schriftlichen Arbeit.

Vorlesung verbunden mit Übung (VU), pi: Diese bestehen aus Vorträgen eines/einer Lehrenden oder mehrerer Lehrender sowie aus in der Lehrveranstaltung durchgeführten Übungen oder Referaten von Seiten der Studierenden. Eine Beurteilung erfolgt durch Bewertung der aktiven Mitarbeit, und – wenn verlangt – durch ein Prüfungsgespräch, ein Referat und/oder die Anfertigung einer schriftlichen Arbeit.

## **§ 9 Teilnahmebeschränkungen**

(1) Für die genannten Lehrveranstaltungen gelten folgende generelle Teilnahmebeschränkungen:

Übung: 25 TeilnehmerInnen

Vorlesung verbunden mit Übung: 25 TeilnehmerInnen

(2) Wenn bei Lehrveranstaltungen mit beschränkter Teilnehmerinnen- und Teilnehmerzahl die Zahl der Anmeldungen die Zahl der vorhandenen Plätze übersteigt, erfolgt die Aufnahme nach dem vom studienrechtlich zuständigen Organ festgelegten Anmeldeverfahren. Das Verfahren ist vom studienrechtlich zuständigen Organ im Mitteilungsblatt der Universität Wien rechtzeitig kundzumachen.

(3) Die Lehrveranstaltungsleiterinnen und Lehrveranstaltungsleiter sind berechtigt, im Einvernehmen mit dem studienrechtlich zuständigen Organ für bestimmte Lehrveranstaltungen Ausnahmen zuzulassen. Auch das studienrechtlich zuständige Organ kann nach Anhörung der Lehrenden Ausnahmen ermöglichen.

## **§ 10 Prüfungsordnung**

(1) Leistungsnachweis in Lehrveranstaltungen

Die Leiterin oder der Leiter einer Lehrveranstaltung hat die Ziele, die Inhalte und die Art der Leistungskontrolle gemäß der Satzung der Universität Wien bekannt zu geben.

**(2) Prüfungsstoff**

Der für die Vorbereitung und Abhaltung von Prüfungen maßgebliche Prüfungsstoff hat vom Umfang her dem vorgegebenen ECTS-Punkteausmaß zu entsprechen. Dies gilt auch für Modulprüfungen.

**(3) Verbot der Doppelanerkennung**

Lehrveranstaltungen und Prüfungen, die bereits für das als Zulassungsvoraussetzung geltende dreijährige Bachelorstudium absolviert wurden, können im Masterstudium nicht nochmals anerkannt werden.

(4) Erbrachte Prüfungsleistungen sind mit dem angekündigten ECTS-Wert dem entsprechenden Modul zuzuordnen, eine Aufteilung auf mehrere Leistungsnachweise ist unzulässig.

## **§ 11 Inkrafttreten**

(1) Dieses Curriculum tritt nach der Kundmachung im Mitteilungsblatt der Universität Wien mit 1. Oktober 2013 in Kraft.

(2) Die Änderungen des Curriculums in der Fassung des Mitteilungsblattes vom 02.02.2016, Nr. 78, 13. Stück, treten mit 1. Oktober 2016 in Kraft.

## Anhang

### Grafische Übersicht

<b>CORE 42 ECTS</b>	<b>SHELL - 48 ECTS</b>	<b>Masterarbeit (27 ECTS) Prüfung (3 ECTS)</b>
	1 Schwerpunkt 24 ECTS	
	3 Ergänzungen (je 6-10 ECTS) insgesamt 24 ECTS	

### CORE Programm

CCNW 1	
CO-AST 1	3 ECTS
CO-PHY 1	3 ECTS
CO-CHE 1	3 ECTS
CO-BIO 1	3 ECTS

CCNW 2 für BSc Informatik und Mathematik	
alle:	
CO-AST 2	3 ECTS
CO-PHY 2	3 ECTS
CO-CHE 2	3 ECTS
CO-BIO 2	3 ECTS

#### 18 ECTS - je nach Vorstudium

APMG 2a für BSc Naturwissenschaften	
CO-MAT 1	6 ECTS
CO-MAT 2	6 ECTS
CO-INF 1	6 ECTS

oder

APMG 2b für BSc Mathematik	
CO-MAT 3	6 ECTS
CO-INF 2	6 ECTS
CO-INF 3	6 ECTS

oder

APMG 2c für BSc Informatik	
CO-MAT 1	6 ECTS
CO-MAT 2	6 ECTS
CO-MAT 3	6 ECTS

oder

MAT-INF-CCNW 2 für BSc der Naturwissenschaften	
zur Wahl:	
CO-MAT 3	6 ECTS
CO-INF 2	6 ECTS
CO-INF 3	6 ECTS
CO-PHY 2	3 ECTS
CO-CHE 2	3 ECTS
CO-BIO 2	3 ECTS
CO-AST 2	3 ECTS

## I) Empfohlener Pfad durch das Studium:

### 1 Das Studium gliedert sich in drei Teile:

#### 1. Das CORE-Programm, welches 60 ECTS anbietet, wovon mindestens 42 absolviert

werden müssen. Die entsprechenden LVAs sind alle neu zu schaffen:

- CO-AST1 (3 ECTS) Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 1
- CO-PHY1 (3 ECTS) Computational Concepts in Physics, Part 1
- CO-CHE1 (3 ECTS) Computational Concepts in Chemistry, Part 1
- CO-BIO1 (3 ECTS) Computational Concepts in Biology, Part 1
- CO-MAT1 (6 ECTS) Introductory Courses in Mathematics I
- CO-MAT2 (6 ECTS) Introductory Courses in Mathematics II
- CO-INF1 (6 ECTS) Introductory Courses in Computer Science
- -----
- CO-AST2 (3 ECTS) Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 2
- CO-PHY2 (3 ECTS) Computational Concepts in Physics, Part 2
- CO-CHE2 (3 ECTS) Computational Concepts in Chemistry, Part 2
- CO-BIO1 (3 ECTS) Computational Concepts in Biology, Part 1
- CO-MAT3 (6 ECTS) Advanced Courses in Mathematics
- CO-INF2 (6 ECTS) Advanced Courses in Computer Science I
- CO-INF3 (6 ECTS) Advanced Courses in Computer Science II

#### 2. Das SHELL-Programm (48 ECTS) setzt sich aus den sechs Fächern

- Mathematik (MAT)
- Informatik (INF)
- Astronomie (AST)
- Physik (PHY)
- Chemie (CHE)
- Biologie (BIO)

zusammen. Es wird aus bestehenden LVAs dieser sechs Fächer zusammengestellt und ist somit aufkommensneutral. Dazu kommen noch nicht absolvierte LVAs aus dem CORE-Programm. Es gliedert sich in ein Schwerpunktsfach mit 24 ECTS und mindestens drei andere Fächer im Ausmaß von 6-10 ECTS damit insgesamt 48 ECTS entstehen.

3. Die Masterarbeit, welche sich aus der eigentlichen Arbeit (27 ECTS) und einem Vortrag (Defensio, 3 ECTS) zusammensetzt.

Aufgrund der verschiedenen Vorkenntnisse wird das Studium in drei Varianten für Mathematiker, Informatiker bzw. Naturwissenschaftler geführt. Den Verlauf des Studiums mit 120 ECTS ersieht man am besten aus der Semestergliederung:

## 2 Für Naturwissenschaftler

- 1.Semester (30 ECTS)

*Pflichtmodul Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1 (12 ECTS):*

- CO-AST1 (3 ECTS) *Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 1*
- CO-PHY1 (3 ECTS) *Computational Concepts in Physics, Part 1*
- CO-CHE1 (3 ECTS) *Computational Concepts in Chemistry, Part 1*
- CO-BIO1 (3 ECTS) *Computational Concepts in Biology, Part 1*

*Alternative Pflichtmodulgruppe 2a (18 ECTS):*

- CO-MAT1 (6 ECTS) *Introductory Courses in Mathematics I*
- CO-MAT2 (6 ECTS) *Introductory Courses in Mathematics II*
- CO-INF1 (6 ECTS) *Introductory Courses in Informatics*

- 2.Semester (30 ECTS)

*Wahlmodulgruppe MAT-INF-CCNW 2 (12 ECTS):*

- *Additional 12 ECTS selected from the CORE-Program*

*Aus dem SHELL-Programm:*

- *First 18 ECTS according to the rules of the SHELL-Program*

- 3.Semester (30 ECTS)

- *Completing the 30 ECTS of the SHELL-Program*

- 4.Semester (30 ECTS)

- *Master Thesis 27 ECTS*

- *Talk (Defensio) 3 ECTS*

### **3 Für Mathematiker**

- **1.Semester (30 ECTS)**

*Pflichtmodul Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1 (12 ECTS):*

- *CO-AST1 (3 ECTS) Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 1*
- *CO-PHY1 (3 ECTS) Computational Concepts in Physics, Part 1*
- *CO-CHE1 (3 ECTS) Computational Concepts in Chemistry, Part 1*
- *CO-BIO1 (3 ECTS) Computational Concepts in Biology, Part 1*

*Aus dem SHELL-Programm:*

- *First 18 ECTS according to the rules of the SHELL-Program*

- **2.Semester (30 ECTS)**

*Pflichtmodulgruppe CCNW2 Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 2 (12 ECTS):*

- *CO-AST2 (3 ECTS) Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 2*
- *CO-PHY2 (3 ECTS) Computational Concepts in Physics, Part 2*
- *CO-CHE2 (3 ECTS) Computational Concepts in Chemistry, Part 2*
- *CO-BIO2 (3 ECTS) Computational Concepts in Biology, Part 2*

*Alternative Pflichtmodulgruppe 2b (18 ECTS):*

- *CO-MAT3 (6 ECTS) Advanced Courses in Mathematics*
- *CO-INF2 (6 ECTS) Advanced Courses in Informatics, Part 2*
- *CO-INF3 (6 ECTS) Advanced Courses in Informatics, Part 3*

- **3.Semester (30 ECTS)**

- *Completing the 30 ECTS of the SHELL-Program*

- **4.Semester (30 ECTS)**

- *Master Thesis 27 ECTS*

*- Talk (Defensio) 3 ECTS*



#### **4 Für Informatiker**

- *1.Semester (30 ECTS)*

*Pflichtmodul Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 1 (12 ECTS):*

- *CO-AST1 (3 ECTS) Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 1*
- *CO-PHY1 (3 ECTS) Computational Concepts in Physics, Part 1*
- *CO-CHE1 (3 ECTS) Computational Concepts in Chemistry, Part 1*
- *CO-BIO1 (3 ECTS) Computational Concepts in Biology, Part 1*

*Aus der Alternativen Pflichtmodulgruppe 2c:*

- *CO-MAT1 (6 ECTS) Introductory Courses in Mathematics I*
- *CO-MAT2 (6 ECTS) Introductory Courses in Mathematics II*

*Aus dem SHELL-Programm:*

- *First 6 ECTS according to the rules of the SHELL-Program*

- *2.Semester (30 ECTS)*

*Pflichtmodulgruppe CCNW2 Computational Concepts in der Naturwissenschaft Teil 2 (12 ECTS):*

- *CO-AST2 (3 ECTS) Computational Concepts in Astronomy and Geosciences, Part 2*
- *CO-PHY2 (3 ECTS) Computational Concepts in Physics, Part 2*
- *CO-CHE2 (3 ECTS) Computational Concepts in Chemistry, Part 2*
- *CO-BIO2 (3 ECTS) Computational Concepts in Biology, Part 2*

*Aus der Alternativen Pflichtmodulgruppe 2c:*

- *CO-MAT3 (6 ECTS) Advanced Courses in Mathematics*

*Aus dem SHELL-Programm:*

- *Further 12 ECTS according to the rules of the SHELL-Program*

- *3.Semester (30 ECTS)*

- *Completing the 30 ECTS of the SHELL-Program*

- *4.Semester (30 ECTS)*

- *Master Thesis 27 ECTS*

*- Talk (Defensio) 3 ECTS*

*Zu Beginn des Studiums wird es eine freiwillige Informationsveranstaltung für Studierende geben. In der Mitte des Studiums wird es ein gemeinsames (Diplomanden-)Seminar für alle*

*Fächer geben. Da keine ECTS dafür vergeben werden, hat es auch den Charakter einer Informationsveranstaltung.*

## II) Lehrveranstaltungsliste SHELL-Programm:

Die nachstehenden Listen geben einen Überblick über die computerorientierten LVA der sechs Fächer Mathematik, Informatik, Astronomie, Physik, Chemie und Biologie, welche für das Schwerpunktsfach und das Ergänzungsfach in Frage kommen. All diese LVA werden bereits in den entsprechenden Masterstudien der sechs Fächer angeboten. Ihre Verwendung für das SHELL-Programm des Masterstudiums „Computational Science“ ist daher kostenneutral.

## Mathematik-LVAs in der SHELL

Aus folgenden Modulen können Lehrveranstaltungen gewählt werden:

### Als Ergänzungsfach (6-10 ECTS aus)

Modul „Funktionalanalysis“ 7 ECTS ( <b>nicht für Mathematiker</b> )
Ziele: Dieses Modul vermittelt eine Einführung in die Theorie der Banach- und Hilberträume und die grundlegenden Techniken und Resultate der linearen Funktionalanalysis und der Operatortheorie.
Lehrveranstaltungen: <ul style="list-style-type: none"><li>• Funktionalanalysis, VO, 3 SSt., 5 ECTS</li><li>• Übungen zu „Funktionalanalysis“, UE, 1 SSt., 2 ECTS</li></ul>
Inhalte: Normierte Räume und Banachräume (Dualraum, Sätze von Hahn-Banach, Banach-Steinhaus und Baire), Hilberträume und Orthonormalsysteme, Klassen von Operatoren (beschränkte, adjungierte, kompakte, Hilbert-Schmidt, symmetrische, ...), Spektraltheorie kompakter Operatoren, Fredholm-Alternative.
Modul „Theorie partieller Differentialgleichungen“ 5 ECTS
Ziele: Dieses Modul vermittelt wesentliche theoretische Grundlagen und Resultate über partielle Differentialgleichungen.
Lehrveranstaltungen: <ul style="list-style-type: none"><li>4. Theorie partieller Differentialgleichungen, VO, 3 SSt., 5 ECTS</li></ul>
Modul „Angewandte Analysis“ 6 ECTS
Ziele: Dieses Modul vermittelt analytische Methoden mit besonderer Beachtung angewandter Aspekte.
Lehrveranstaltungen: <ul style="list-style-type: none"><li>– Angewandte Analysis, VO, 4 SSt., 6 ECTS</li></ul>
Modul „Mathematische Populationsgenetik“ 5 ECTS
Ziele: Dieses Modul vermittelt mathematische Grundlagen der Populationsgenetik
Lehrveranstaltung: <ul style="list-style-type: none"><li>• Mathematische Populationsgenetik, VO, 3 SSt., 5 ECTS</li></ul>
Modul „Mathematische Ökologie“ 5 ECTS
Ziele: Dieses Modul vermittelt mathematische Grundlagen der Ökologie

Lehrveranstaltung:

1. Mathematische Ökologie und Musterbildung, VO, 3 SSt., 5 ECTS

Modul „Spieltheorie“ 5 ECTS

Ziele: Dieses Modul vermittelt die mathematischen Grundlagen der Spieltheorie und Gleichgewichtsprobleme

Lehrveranstaltung:

1. Spieltheorie, VO, 3 SSt., 5 ECTS

### Als Schwerpunktsfach (24 ECTS aus)

Modul „Funktionalanalysis“ 7 ECTS (**nicht für Mathematiker**)

Ziele: Dieses Modul vermittelt eine Einführung in die Theorie der Banach- und Hilberträume und die grundlegenden Techniken und Resultate der linearen Funktionalanalysis und der Operatortheorie.

Lehrveranstaltungen:

- Funktionalanalysis, VO, 3 SSt., 5 ECTS
- Übungen zu „Funktionalanalysis“, UE, 1 SSt., 2 ECTS

Inhalte: Normierte Räume und Banachräume (Dualraum, Sätze von Hahn-Banach, Banach-Steinhaus und Baire), Hilberträume und Orthonormalsysteme, Klassen von Operatoren (beschränkte, adjungierte, kompakte, Hilbert-Schmidt, symmetrische, ...), Spektraltheorie kompakter Operatoren, Fredholm-Alternative.

Modul „Theorie partieller Differentialgleichungen“ 5 ECTS

Ziele: Dieses Modul vermittelt wesentliche theoretische Grundlagen und Resultate über partielle Differentialgleichungen.

Lehrveranstaltungen:

Theorie partieller Differentialgleichungen, VO, 3 SSt., 5 ECTS

Inhalte: Funktionalanalytische Methoden und Sobolevraum-Techniken, Erhaltungssätze, (semi-)lineare elliptische Gleichungen.

Modul „Angewandte Analysis“ 6 ECTS

Ziele: Dieses Modul vermittelt analytische Methoden mit besonderer Beachtung angewandter Aspekte.

Lehrveranstaltungen:

Angewandte Analysis, VO, 4 SSt., 6 ECTS

Inhalte: Einführung in ein oder zwei wichtige Teilgebiete der Analysis (wie Differentialgleichungen, Fourieranalysis, asymptotische Analysis o. dgl.) unter besonderer Bezugnahme auf angewandte Aspekte.

Modul „Mathematische Populationsgenetik“ 5 ECTS

Ziele: Dieses Modul vermittelt mathematische Grundlagen der Populationsgenetik

Lehrveranstaltung:

Mathematische Populationsgenetik, VO, 3 SSt., 5 ECTS

Inhalte: Gesetz von Hardy-Weinberg, Selektionsmodelle, Rekombination, neutrales Wright-Fisher Modell, Mutations-Selektionsmodelle.

**Modul „Mathematische Ökologie“ 5 ECTS**

**Ziele:** Dieses Modul vermittelt mathematische Grundlagen der Ökologie

**Lehrveranstaltung:**  
Mathematische Ökologie und Musterbildung, VO, 3 SSt., 5 ECTS

**Inhalte:** logistisches Wachstum, Räuber-Beute Gleichungen, Konkurrenzmodelle, Lotka-Volterra Gleichungen für  $n$  Arten, Permanenz, Altersstruktur, räumliche Modelle, Turing-Mechanismus, Tierfelle, Chemotaxis, Morphogenese.

**Modul „Spieltheorie“ 5 ECTS**

**Ziele:** Dieses Modul vermittelt die mathematischen Grundlagen der Spieltheorie und Gleichgewichtsprobleme

**Lehrveranstaltung:**  
Spieltheorie, VO, 3 SSt., 5 ECTS

**Inhalte:** Gefangenendilemma, Ultimatumspiel, dominierte Strategien, Nullsummenspiele und MinMax, Nashgleichgewicht, evolutionäre Spieltheorie, Falken-Tauben, sex-ratio, Replikatorgleichung, best response Dynamik.

Genau ein Seminar aus Analysis, angewandter Mathematik, Biomathematik oder Stochastik (Module MANS, MAMS, MBIS, MSTS aus dem Mathematikkatalog) (jeweils 4 ECTS)

**Modul „Seminare: Mathematik“ 4 ECTS**

**Ziele:** Dieses Modul vermittelt aktuelle Forschungsergebnisse aus der Mathematik und lehrt das eigenständige Erarbeiten wissenschaftlicher Forschungsergebnisse sowie das Erstellen wissenschaftlicher Arbeiten und das Vortragen wissenschaftlicher Ergebnisse.

**Lehrveranstaltungen:**

1. Seminar, SE, 2 SSt., 4 ECTS  
aus den Bereichen Analysis, Angewandte Mathematik, Biomathematik oder Stochastik  
(Module MANS, MAMS, MBIS, MSTS aus dem Mathematikkatalog)

oder

2. Projektseminar, PJSE, 2 SSt., 4 ECTS  
aus den Bereichen Analysis, Angewandte Mathematik, Biomathematik oder Stochastik  
(Module MANS, MAMS, MBIS, MSTS aus dem Mathematikkatalog)

<b>Module „Vertiefung: Mathematik“ (3-6 ECTS)</b>
<b>Ziele:</b> Diese Module vermitteln vertiefendes Wissen in den mathematischen Aspekten des Computational Science
<b>Lehrveranstaltung:</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>alle Lehrveranstaltungen aus dem Lehrveranstaltungskatalog der Mathematik unter den Prüfungspass-Codes MANV, MAMV, MBIV, <b>MLOV</b> und MSTV, z.B.                     <ul style="list-style-type: none"> <li>Finanzmathematik</li> <li>Harmonische Analysis</li> <li>Nichtlineare Schrödinger-Gleichungen</li> <li>Numerische Methoden für gewöhnliche Differentialgleichungen</li> <li>Numerische Methoden für partielle Differentialgleichungen</li> <li>Dynamische Prozesse</li> <li>Mathematische Zellbiologie</li> <li>Stochastische Analysis</li> <li>Höhere Funktionalanalysis</li> <li>Inverse Probleme</li> <li>Bild- und Signalverarbeitung</li> <li>Numerische Lineare Algebra</li> <li>Konvexe Optimierung</li> <li>Innere-Punkte-Verfahren</li> <li>Kombinatorische Optimierung</li> <li>Globale Optimierung</li> <li>Nonlinear Waves</li> <li>Variational calculus and geometric measure theory</li> <li>Kontrolltheorie</li> <li>Variationsrechnung</li> <li>Einführung in die theoretische Informatik</li> <li>Berechenbarkeit und Komplexität</li> </ul> </li> </ol>

## Astronomie-LVAs in der SHELL

Aus folgenden Modulen können Lehrveranstaltungen gewählt werden:

<i>SH-AST1</i>	<b>Numerische Methoden der Astronomie, VO</b>	<b>5 ECTS</b>
<b>Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>keine</i>	
<b>Empfohlene Teilnahmevoraussetzung</b>	<i>CO-AST1, CO-AST2</i>	
<b>Modulziele</b>	<i>Grundlagen der numerischen Behandlung und Formulierung von astrophysikalischen Fragestellungen, spezielle Anforderungen an astrophysikalische Simulationen, Verständnis und Probleme numerischer Techniken und Verfahren</i>	
<b>Inhalte</b>	<i>Fehler- und Ausgleichsrechnung, statistische Methoden, Testverfahren, Interpolations- und Extrapolationsmethoden, Integrationsmethoden, Approximation von Funktionen, UNIX, wissenschaftliche und grafische Programmumgebungen, Symbolic Computation, numerische Problemlösungsstrategien, Nutzung von astronomisch relevanten Datenbanken</i>	
<b>Leistungsnachweis</b>	<i>Abschluss aller Lehrveranstaltungen</i>	
<i>SH-AST2</i>	<b>Übungen zu Numerische Methoden in der Astronomie, UE</b>	<b>4ECTS</b>

<b>Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>Keine</i>
<b>Empfohlene Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>CO-AST1, CO-AST2</i>
<b>Modulziele</b>	<i>Praktische Anwendungen der numerischen Techniken und Verfahren zur Lösung astrophysikalischer Methoden</i>
<b>Inhalte</b>	<i>Fehler- und Ausgleichsrechnung, statistische Methoden, Testverfahren, Interpolations- und Extrapolationsmethoden, Integrationsmethoden, Approximation von Funktionen, UNIX, wissenschaftliche und grafische Programmumgebungen, Symbolic Computation, numerische Problemlösungsstrategien, Nutzung von astronomisch relevanten Datenbanken</i>
<b>Leistungsnachweis</b>	<i>Abschluss aller Lehrveranstaltungen</i>

<i>SH-AST3</i>	<b>Praktikum aus numerischer Astronomie, PR</b>	<b>13 ECTS</b>
<b>Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>keine</i>	
<b>Empfohlene Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>CO-AST1, CO-AST2</i>	
<b>Modulziele</b>	<i>Lösungsstrategien und Anwendung numerischer Simulationstechniken zur Behandlung astrophysikalischer Fragestellungen</i>	
<b>Inhalte</b>	<i>Numerische Simulationen und Methoden, eigenständige Programmentwicklung, höhere Programmiersprachen, Durchführung und Planung numerischer Simulationen, Auswertung und Darstellung der Ergebnisse</i>	
<b>Leistungsnachweis</b>	<i>Abschluss aller Lehrveranstaltungen</i>	

<i>SH-AST4</i>	<b>Computational Astrophysics, SE</b>	<b>4 ECTS</b>
<b>Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>Keine</i>	
<b>Empfohlene Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>CO-AST1, CO-AST2</i>	
<b>Modulziele</b>	<i>Vorträge zu aktuellen Ergebnissen und Methoden astrophysikalischer Simulationen</i>	
<b>Inhalte</b>	<i>Astrophysikalische numerische Simulationen, Fehleranalyse, Visualisierung und Datenauswertung</i>	
<b>Leistungsnachweis</b>	<i>Abschluss aller Lehrveranstaltungen</i>	

<i>SH-AST5</i>	<b>Numerical Methods in Astrophysics, SE</b>	<b>4 ECTS</b>
<b>Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>keine</i>	
<b>Empfohlene Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>CO-AST1, CO-AST2</i>	
<b>Modulziele</b>	<i>Anwendung und Anpassung numerischer Methoden auf astrophysikalische Fragestellungen</i>	

<b>Inhalte</b>	<i>Numerische Methoden mit spezifischen Anwendungen in astrophysikalischen Problemen, aktuelle Software Entwicklungen in Astronomie und Astrophysik</i>
<b>Leistungsnachweis</b>	<i>Abschluss aller Lehrveranstaltungen</i>

## Informatik-LVAs in der SHELL

Aus folgenden Modulen können Lehrveranstaltungen gewählt werden:

<i>SH-INF-ERG</i>	<b>Informatik Ergänzungsfach</b>	<b>6 – 10 ECTS</b>
<b>Empfohlene Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>CO-INF1, CO-INF2</i>	
<b>Modulziele</b>	<i>In-depth knowledge of techniques for scientific data management, data analysis, machine learning, visualization, algorithms and programming in scientific computing, and software tools and libraries in scientific computing</i>	
<b>Modulstruktur</b>	VU Scientific Data Management, 6 ECTS  VU Methoden der Datenanalyse, 3 ECTS  VU Machine Learning, 3 ECTS  VU Visualisierung, 6 ECTS  VU Algorithmen und Programmierung im Scientific Computing, 6 ECTS  VU Software Tools and Libraries, 6 ECTS	
<b>Leistungsnachweis</b>	<i>Abschluss aller Lehrveranstaltungen</i>	

<i>SH-INF-FOC</i>	<b>Informatik Schwerpunktsfach</b>	<b>24 ECTS</b>
<b>Empfohlene Teilnahme-voraussetzung</b>	<i>CO-INF1, CO-INF2</i>	
<b>Modulziele</b>	<i>In depth knowledge of techniques for scientific data management, data analysis, machine learning, visualization, algorithms and programming in scientific computing, and software tools and libraries in scientific computing, advanced algorithms analysis techniques, parallel architectures and programming models, and multimedia retrieval</i>	
<b>Modulstruktur</b>	VU Algorithmen und Programmierung im Scientific Computing, 6 ECTS  VU Parallele Architekturen und Programmiermodelle, 6 ECTS  VU Software Tools and Libraries, 6 ECTS  VU Advanced Algorithms, 3 ECTS	







- *270073 VO Computergrafik und Molekulare Modellierung*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,5 ECTS*

*Kapitel: 5.08; 27.01; 31.01*

*TC-3, M205, M206*

- *270275 VO Computersimulation von Biomolekülen*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 3,0 ECTS*

*Kapitel: 27.01*

*CHE II-7*

*Übungen 7 ECTS*

..

- *270037 UE Übungen zu Computergrafik und Molekulare Modellierung*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*4 Stunde(n), 4,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01; 31.01*

*TC-3, M205, M206*

..

- *270274 UE Übungen zur Computersimulation von Biomolekülen*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*3 Stunde(n), 3,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01*

*CHE II-7, MMB W-3*

*Seminare 4 ECTS*

- *270060 SE Seminar: Methoden der Biomolekularen Simulation*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.03; 44.01*

- *270223 SE Seminar: Elektrostatik von Biomolekülen*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.03; 44.01*

### **3 Theoretische Biochemie (26.5 ECTS)**

*Vorlesungen 8.5 ECTS*

- *270037 VO Chemieinformatik*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*1 Stunde(n), 1,0 ECTS*

*Kapitel: 27.01*

*TC-1*

- *270087 VO Struktur und Dynamik von Biopolymeren*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 3,0 ECTS*

*Kapitel: 27.01*

*CHE II-7*

- *270090 VO Biomolekulare Nanotechnologie*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*1 Stunde(n), 1,5 ECTS*

*Kapitel: 27.01*

*CHE II-7*

- *300696 VO Grundlagen der Systembiologie*

*Studienprogrammleitung Biologie*

*2 Stunde(n), 3,0 ECTS*

*Kapitel: 30.01; 31.01*

*MMB W-3, MMB W-2, M206*

*Übungen (12 ECTS):*

- *270065 UE Praktikum zu Bioinformatischen Problemen aus Chemie und Biologie*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*4 Stunde(n), 4,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01*

*CHE II-7*

..

- *270038 UE Übungen zu Chemieinformatik*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01*

*TC-1*

- *270034 UE Algorithmen und Programmentwicklung für die Biologische Chemie*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*4 Stunde(n), 4,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01*

*CHE II-7*

..

- *270038 UE Übungen zu Struktur und Dynamik von Biopolymeren*

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01; 31.01*

*CHE II-7*

*Seminare (6 ECTS):*

- 270034 SE Seminar zu speziellen Themen der Theoretischen Chemie

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01; 27.03; 44.01*

*EF-1, EF-2, EF-3.*

- 270226 SE Methoden der Theoretischen Biochemie I

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.01*

*EF-1, EF-2, EF-3.*

- 270099 SE Spezielle Themen der Bio- und Chemie-Informatik

*Studienprogrammleitung Chemie*

*2 Stunde(n), 2,0 ECTS*

*Prüfungsimmanente Lehrveranstaltung*

*Kapitel: 27.04; 44.01*

**Macht in Summe 12 + 16.5 + 26.5 = 55 ECTS für das SHELL-Modul**

## **Biologie-LVAs in der SHELL**

In der SHELL zugelassene Lehrveranstaltungen aus dem Bereich der Lebenswissenschaften sind in den folgenden Tabellen aufgeführt. Darüber hinaus können nach Zulassung durch die SPL alle nicht aufgeführten Lehrveranstaltungen aus allen Master-Studiengängen der SPL Molekulare Biologie und SPL Biologie sowie dem Diplomstudiengang Pharmazie gewählt werden. Die Wahl von prüfungsimmanenten Lehrveranstaltungen aus Studiengängen der Studienprogrammleitung Biologie bzw. Molekulare Biologie ist überdies von der Studienprogrammleitung Biologie bzw. Molekulare Biologie vorab zu genehmigen.

### 1. SPL Molekulare Biologie

#### 1.1 Veranstaltungen im Master Mikrobiologie und Immunbiologie:

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MMI III-1</b>	Mikrobiologie/Immunbiologie für Fortgeschrittene - Advanced Microbiology/Immunobiology	15

#### 1.2 Veranstaltungen im Master Genetik und Entwicklungsbiologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MGE III-1</b>	Genetik für Fortgeschrittene - Advanced Genetics	15

#### 1.3 Veranstaltungen im Master Molekulare Biologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MMB W-2</b>	Spezielle Fachverbreiterung (Theorie und Übungen) - Selected Subjects in Molecular Biosciences or Chemistry	15
<b>MMB W-3</b>	Spezielle Fachverbreiterung (Bioinformatik) - Selected Subjects in Bioinformatics	15

## 2. SPL Biologie

### 2.1 Veranstaltungen im Master Anthropologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MAN 2</b>	Weiterführende Statistik in der Anthropologie – Advanced Statistics in Anthropology	5

### 2.2 Veranstaltungen im Master Evolutionsbiologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MEV W-3</b>	Theoretische Biologie – Theoretical Biology	10

### 2.3 Veranstaltungen im Master Naturschutz und Biodiversitätsmanagement

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MNB W-4</b>	Raumanalytische Methoden im Naturschutz - Spatial Analysis and Presentation Techniques	5

### 2.4 Veranstaltungen im Master Ökologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MOE III-1</b>	Mikrobielle Genomik und Phylogenie – Microbial Genomics and Phylogeny	10
<b>MOE III-3</b>	Ökogenetik – Genetics in Ecology	10
<b>MOE W-1</b>	Ökologische Dateninterpretation - Interpretation of Ecological Data	5
<b>MOE W-5</b>	Molekulare und Chemische Methoden der Ökologie - Molecular and Chemical Methods in Ecology	15

### 2.5 Veranstaltungen im Master Paläobiologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MPB3</b>	Paläontologische Evolutionsforschung - Palaeontology and Evolution	5

### 2.6 Veranstaltungen im Master Pflanzenwissenschaften

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MPF III-2</b>	Funktionelle Genomik von Pflanzen - Plant Functional Genomics	10
<b>MPF W-3</b>	Spezialthemen zu Molekularer Pflanzenbiologie und Pflanzenphysiologie - Advanced Topics of Plant Molecular Biology	10

### 2.7 Veranstaltungen im Master Verhaltens-, Neuro- und Kognitionsbiologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
<b>MVN2</b>	Grundlagen wissenschaftlichen Arbeitens in der Verhaltensbiologie, Neurobiologie und Kognitionsbiologie - Fundamentals of Scientific Research in Behaviour, Neurobiology and Cognition	10

### 2.8 Alle Veranstaltungen im Master Zoologie

<b>Modul</b>	<b>Titel</b>	<b>ECTS</b>
--------------	--------------	-------------

### 3. SPL Pharmazie

#### 3.1 Veranstaltungen im dritten Studienabschnitt des Diplomstudiengang Pharmazie Wahlpflichtfächer (PG, 2, siehe Anlage 1, 2.0)

#### III) Inhalte der Lehrveranstaltungen des CORE-Programms:

##### CO-MAT1:

1. *Basic concepts of numerical analysis, errors, classification of errors, error analysis, condition of a problem, numerical stability of an algorithm*
2. *Interpolation by polynomials and splines (up to cubic)*
3. *Interpolation by trigonometric functions, FFT*
4. *Numerical Linear Algebra I*
  - a. *LU decomposition, solution of linear systems of equations*
  - b. *Cholesky decomposition*
  - c. *QR decomposition and solution of least squares problems*
5. *Solution of univariate nonlinear equations*
6. *Computation of univariate integrals*
7. *Probability Theory and Statistics*
  - a. *Basic concepts*
  - b. *Statistical tests*
  - c. *Realisation of statistical tests*
8. *Ordinary differential equations*
  - a. *Single-step methods*
  - b. *Multi-step methods*
  - c. *Stiff ODEs*

##### CO-MAT2:

1. *Numerical Linear Algebra II*
  - a. *Eigenvalue Problem*
  - b. *Generalized Eigenvalue Problem*
  - c. *Singular Value Decomposition*
  - d. *Iteration methods for large systems*
    - i. *Fixed point iteration*
    - ii. *SOR method*
    - iii. *Krylov-space methods (Lanczos, Arnoldi, CG, GMRES, etc.)*
2. *Nonlinear systems of equations*
  - a. *Newton's method*
  - b. *Quasi-Newton methods*
  - c. *Basic line search concepts (exact, Armijo,...)*
3. *Stochastic Processes*
  - a. *Basic concepts*
  - b. *Markov chains*
4. *Random Numbers*
  - a. *Pseudorandom number generators*
  - b. *Tests of pseudorandom numbers*
5. *Monte Carlo Methods*
  - a. *Basic concepts of simulation*
6. *Multivariate Integration*
  - a. *Monte Carlo method*
  - b. *Quasi-Monte Carlo method*

### CO-INF1:

*Introduction to programming, classification of programming languages  
Object-oriented software engineering, analysis and design patterns  
Testing, software measurement and metrics  
Software development tools integrated development environments  
Software architecture*

### CO-AST2:

*Astrophysikalische Hydrodynamik (laminar, turbulent und Überschall), Magneto- und Strahlungshydrodynamik, Sternsysteme und ihre dynamische Entwicklung (Momente der Boltzmann-Gleichung)*

### CO-PHY1:

*Introduction to computational problems in physics with emphasis on fundamental concepts in classical and quantum mechanics (Newton equation, Maxwell equations, Schrödinger equation).*

### CO-PHY2:

*Introduction to computational problems in physics covering thermodynamics, statistical mechanics and stochastic methods. Introduction to statistical mechanics: ensembles, expectation values, partition sum and free energy. Non-stochastic methods: integration of equation of motion (Verlet, symplectic algorithms), molecular systems and constraints, thermostats (Langevin, Nose). Stochastic methods in classical systems: importance sampling (Markov chains), Ising model, simulating ensembles. Stochastic methods in quantum systems: variational Monte Carlo, diffusion Monte Carlo and path integral methods.*

### CO-CHE2:

#### *2.1 Graph theoretical approaches*

- 1. Representing molecules and reactions in the computer.*
- 2. Graph isomorphism problem and canonical labeling.*
- 3. Structure-function relationship and multivariate data analysis.*
- 4. Combinatorial chemistry.*

#### *2.2 Stochastic methods and reaction kinetics*

- 1. Chemical master equation and Markov models.*
- 2. Building blocks in reaction kinetics.*
- 3. Large reaction networks in homogeneous phase.*
- 4. Spatial inhomogeneity and diffusion.*

### CO-BIO2:

#### *Functional genomics*

- 5. Large-scale experimental methods*
- 6. Data management, reduction, normalization*
- 7. Methods for differential analysis and clustering*
- 8. Enrichment analysis and network-based analysis*



### *Biological networks*

- *Topological analysis*
- *Stoichiometric analysis (MFA, FBA)*
- *Rule-based modeling of combinatorial complex networks*
- *Differential equation based methods*
- *Process algebras and model-checking*

### *Organisms and ecosystems*

*Genetics and metabolomics*

*Systems biology of human diseases*

*Dynamical modeling of organism development (including imaging)*

*Environmental modeling (coenzymatic theories, stoichiometry based theories)*

### CO-MAT3:

#### *Numerische Methoden III:*

2. *Classification of optimization problems*
3. *Descent methods*
4. *Line search, advanced concepts*
  - a. *Efficient line search*
  - b. *Goldstein condition*
  - c. *Wolfe condition*
  - d. *Moré-Thuente line search*
  - e. *Bent line search*
5. *Local models*
6. *(Quasi)-Newton methods*
7. *BFGS, L-BFGS, L-BFGS-B*
8. *Basic concepts of SQR methods*

#### *Numerische Methoden IV:*

2. *Partial Differential Equations of order 1*
3. *Partial Differential Equations of order 2*
  - *Types of PDEs*
4. *Finite Difference Methods*
  - *Lax Equivalence Theorem*
5. *Finite Element Methods*
6. *Singular perturbations, hyperbolic conservation laws (overview only)*

### CO-INF2:

*Logical data organization, relational model, query languages, conceptual modeling, transactions and recovery, integrity and safety*  
*data stream management, machine learning, data visualization*

### CO-INF3:

*Main hardware/computer architectural paradigms: distributed and shared memory architectures, heterogeneous architectures*

*Introduction to parallel programming; major parallel programming interfaces/languages, software tools and libraries*

*Notation, analysis of algorithms, complexity theory*

*Elementary data structures, trees, hashing, graph algorithms*

*Algorithm design: divide and conquer, dynamic programming, greedy algorithms, randomized algorithms, amortized analysis, linear programming and approximation algorithms*

