

# Physik auf dem Computer I & II

PD Dr. S. Luding, Prof. Dr. H. J. Herrmann,  
Dr. S. Schwarzer, Dipl. Phys. Matthias Müller,  
Dr. H.-G. Matuttis, Dipl. Phys. M. Brunner,  
Dipl. Phys. M. Lätzel, Dipl. Phys. C. Manwart  
T. Karle und S. Manmana  
Uni-Stuttgart

8. Juli 1999



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
1.1	Was heißt “Physik auf dem Computer” . . . . .	1
1.1.1	Vom Menschen zum Computer und zurück . . . . .	2
1.1.2	Das erste Beispiel . . . . .	3
1.2	Programmier-Philosophie . . . . .	6
1.3	Geschichte der Programmierung mit C++ . . . . .	7
1.4	Anwendungsbeispiele . . . . .	8
1.5	Literatur . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Grundlagen von C++</b>	<b>9</b>
2.1	Sprachkonstrukte . . . . .	9
2.2	Kommentare . . . . .	11
2.3	Datentypen, Variablen, Konstanten . . . . .	12
2.3.1	Grundlegende Datentypen und Deklaration . . . . .	12
2.3.2	Variablenattribute . . . . .	15
2.3.3	Lebensdauer und Lage der Variablen im Systempeicher . . . . .	15
2.3.4	Felder . . . . .	16

2.4	Kontrollstrukturen . . . . .	17
2.4.1	if-Anweisung . . . . .	17
2.4.2	Ternärer ?:-Operator . . . . .	18
2.4.3	(do) while-Schleifen . . . . .	19
2.4.4	for-Schleifen . . . . .	20
2.4.5	break und continue . . . . .	20
2.4.6	goto-Anweisung, Labels . . . . .	21
2.4.7	switch-Anweisung . . . . .	22
2.5	Funktionen und Operatoren . . . . .	23
2.5.1	Funktionen ohne Argumente oder Rückgabewert, void . . . . .	26
2.5.2	Bibliotheken . . . . .	26
2.5.3	Operatoren . . . . .	27
2.5.4	inline Funktionen . . . . .	30
2.5.5	Defaultargumente . . . . .	32
2.5.6	Überladen von Funktionen . . . . .	33
2.6	Zeiger, Zeiger-Feld-Dualität, und Referenzen . . . . .	34
2.6.1	Zeiger . . . . .	34
2.6.2	Zeiger-Feld-Dualität . . . . .	39
2.6.3	Feldvariablenübergabe an Funktionen, dynamische Speicher- verwaltung . . . . .	39
2.6.4	Referenzen . . . . .	41
2.6.5	typedef . . . . .	42
2.7	Bezugsrahmen von Bezeichnern . . . . .	42

2.8	Ein- und Ausgabe . . . . .	43
2.8.1	Elementfunktionen der iostreams . . . . .	44
2.8.2	Formatierung . . . . .	45
2.8.3	Dateien (Files) . . . . .	47
2.9	Dynamische Speicherverwaltung . . . . .	48
2.10	Organisation in Implementierungs- und Header-Dateien . . . . .	49
2.11	Weiterführende Literatur . . . . .	50
<b>3</b>	<b>Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichung</b>	<b>51</b>
3.1	Der Harmonische Oszillator . . . . .	51
3.1.1	Das Euler-Verfahren . . . . .	53
3.1.2	Die Euler-Cromer-Methode . . . . .	55
3.2	Das Pendel . . . . .	55
3.2.1	Die Verlet-Methode . . . . .	57
3.2.2	Das allgemeine Pendel . . . . .	59
3.2.3	Das Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	59
3.2.4	Chaos . . . . .	62
3.2.5	Der Poincaréschnitt . . . . .	63
3.2.6	Übergang periodisch – chaotisch . . . . .	64
3.3	Himmelsmechanik . . . . .	65
3.3.1	Erde und Jupiter . . . . .	70
3.3.2	Das Drei-Körper-Problem . . . . .	73
3.3.3	Perihelbewegung des Merkurs . . . . .	74

3.3.4	Starre Körper . . . . .	74
3.4	Molekulardynamik . . . . .	74
3.4.1	Das Heliumatom . . . . .	75
3.4.2	Optimierung . . . . .	76
3.4.3	Weitere Vielteilchensysteme . . . . .	77
<b>4</b>	<b>Populationsdynamik</b>	<b>79</b>
4.1	Betrachtung einer einzelnen Spezies . . . . .	79
4.1.1	Iterative Modelle . . . . .	79
4.1.2	Gewöhnliche Differentialgleichungen . . . . .	80
4.2	Zwei und mehr Spezies . . . . .	83
4.2.1	Volterra–Gleichung (1925) . . . . .	83
4.2.2	Lotka–Volterra–Gleichung (1926) . . . . .	84
4.2.3	Folgerungen . . . . .	85
4.3	Ausblick: Diskrete Modelle . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Gitter- oder Stochastische Modelle</b>	<b>87</b>
5.1	Zufallszahlen . . . . .	87
5.1.1	Kongruentieller RNG “IBM” . . . . .	87
5.1.2	Lagged Fibonacci Sequenzen . . . . .	90
5.1.3	Testen von Zufallszahlen . . . . .	92
5.2	Zellularautomaten . . . . .	93
5.3	Game of life . . . . .	96
5.4	Random walks (RW) . . . . .	100

5.5	Random Walk und Diffusion . . . . .	105
5.6	Fehler, Varianz und lineare Regression . . . . .	106
5.6.1	Fehler . . . . .	106
5.6.2	Lineare Regression . . . . .	107
5.7	Weitere Anwendungsbeispiele . . . . .	108
5.7.1	Perkolation . . . . .	109
5.7.2	Das Edenmodell . . . . .	115
5.7.3	Diffusions-limitierte Anlagerung DLA . . . . .	119
5.7.4	Fraktale durch Iterationen . . . . .	123
5.7.5	Random Midpoint Displacement . . . . .	128
<b>6</b>	<b>Numerisches Differenzieren und Integrieren</b>	<b>131</b>
6.1	Differenzieren . . . . .	131
6.1.1	Die erste Ableitung . . . . .	131
6.1.2	Die zweite Ableitung . . . . .	133
6.1.3	Numerische Probleme . . . . .	133
6.2	Quadraturen . . . . .	133
6.2.1	Die Mittelpunktsregel . . . . .	134
6.2.2	Die Trapezregel . . . . .	136
6.2.3	Die Simpsonregel . . . . .	136
6.3	Gaußsche Quadratur . . . . .	137
6.3.1	Lineare Näherung . . . . .	138
6.3.2	Quadratische Näherung . . . . .	139

6.3.3	Beliebige Stützstellen . . . . .	139
6.3.4	Legendre-Polynome . . . . .	140
6.3.5	Weiterführende Literatur . . . . .	143
6.4	Monte-Carlo Integration . . . . .	143
6.4.1	Berechnung der Zahl $\pi$ . . . . .	144
6.4.2	Berechnung höherdimensionaler Integrale . . . . .	146
<b>7</b>	<b>Interpolation und Approximation</b>	<b>149</b>
7.1	Polynomiale Interpolation . . . . .	150
7.1.1	Lagrange-Interpolation . . . . .	150
7.1.2	Neville Schema . . . . .	151
7.2	Rationale Interpolation . . . . .	153
7.3	Spline-Funktionen . . . . .	155
7.4	Weiterführende Literatur . . . . .	157
<b>8</b>	<b>Analyse von Meßsignalen</b>	<b>159</b>
8.1	Klassifikation . . . . .	159
8.2	Kontinuierliche, periodische Signale . . . . .	160
8.2.1	Fourier-Approximation vs. Interpolation . . . . .	164
8.2.2	Komplexe Fourierreihen . . . . .	164
8.3	Fouriertransformation . . . . .	165
8.3.1	Herleitung/Definition . . . . .	165
8.3.2	Eigenschaften der Fouriertransformation . . . . .	166
8.3.3	Kreuz- und Autokorrelationsfunktion . . . . .	167



8.3.4	Autokorrelation zur Rauschunterdrückung . . . . .	170
8.3.5	Faltung . . . . .	171
8.3.6	Faltungssatz und lineare Systemtheorie . . . . .	172
8.3.7	Fouriertransformation der $\delta$ -Funktion . . . . .	174
8.3.8	Spektrale Leistungsdichte . . . . .	174
8.4	Abgetastete Signale . . . . .	175
8.4.1	Diskrete Fouriertransformation (DFT) . . . . .	176
8.4.2	Schnelle Fouriertransformation (FFT) . . . . .	177
<b>9</b>	<b>Optimierung</b>	<b>181</b>
9.1	Motivation . . . . .	181
9.2	Das Ising-Modell und Verwandte . . . . .	182
9.2.1	Spingläser . . . . .	183
9.2.2	Das Handelsreisendenproblem . . . . .	184
9.3	Genetische Algorithmen . . . . .	186
9.4	Simulated Annealing . . . . .	190
9.4.1	Hill Climbing . . . . .	191
9.4.2	Stochastic Hill Climbing . . . . .	192
9.4.3	Metropolis Monte Carlo und Simulated Annealing . . . . .	192
<b>10</b>	<b>Neuronale Netze</b>	<b>197</b>
10.1	Einführung . . . . .	197
10.2	Modellneuronen . . . . .	199
10.3	Das Perzeptron . . . . .	200

10.4	Mehrschichtige Netze . . . . .	203
10.5	Rückgekoppelte Netze . . . . .	205
10.6	Weiterführende Literatur . . . . .	206
<b>11</b>	<b>Lineare Algebra</b>	<b>209</b>
11.1	Elementare Verfahren . . . . .	209
11.1.1	Lineare Gleichungssysteme . . . . .	209
11.1.2	Matrixinversion . . . . .	210
11.1.3	Berechnung von Eigenwerten . . . . .	211
11.2	Beispiele . . . . .	212
11.2.1	Der Trägheitstensor . . . . .	213
11.2.2	Der Spannungstensor . . . . .	214
11.2.3	Die lineare Kette . . . . .	215
<b>12</b>	<b>Partielle Differentialgleichungen</b>	<b>217</b>
12.1	Elliptische partielle Differentialgleichungen . . . . .	218
12.1.1	Diskretisierung . . . . .	218
12.1.2	Randbedingungen . . . . .	219
12.1.3	Iterative Lösungsverfahren . . . . .	219
12.2	Parabolische partielle Differentialgleichungen . . . . .	221
12.3	Hyperbolische partielle Differentialgleichungen . . . . .	226
12.4	Weiterführende Literatur . . . . .	226
<b>13</b>	<b>Anwendungsbeispiele</b>	<b>227</b>

13.1 Soziologie . . . . .	227
13.2 Ökonomie und Wirtschaft . . . . .	231
13.3 Parallele Anwendung verschiedener Methoden . . . . .	232
13.3.1 Mean-Field Kontinuumsbeschreibung . . . . .	232
13.3.2 Exakte, Diskrete Lösung des Problems . . . . .	234
<b>14 Computeralgebra mit Maple</b>	<b>237</b>
14.1 Einführung . . . . .	237
14.2 Eingabe . . . . .	238
14.3 Hilfe, Dokumentation online . . . . .	239
14.4 Variablen, Zuweisung und Auswertung . . . . .	239
14.5 Eingebaute Funktionen und Prozeduren . . . . .	242
14.6 Verzögerung der Auswertung, Numerik . . . . .	246
14.7 Objektattribute . . . . .	247
14.8 Weitere Datenstrukturen . . . . .	247
14.9 Lineare Algebra . . . . .	250
14.10 Grafik . . . . .	251
14.11 Ein- und Ausgabe, Zusammenarbeit mit anderen Programmen . . . . .	253
14.12 Weiteres . . . . .	254

