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, T. Karle und S. Manmana
Uni–Stuttgart

11. Februar 1999

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **1**

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

2 Grundlagen von C++ **9**

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 Systemspeicher 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 Speicherverwaltung 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

3 Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichung 51

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

4 Populationsdynamik **79**

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

5 Gitter- oder Stochastische Modelle **87**

5.1 Zufallszahlen 87

5.1.1 Kongruentieller RNG “IBM” 87

5.1.2 Lagged Fibbonacci 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