
Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Was ist Computerphysik?	1
1.2	Entwicklung der Computerphysik	3
1.3	Inhalt der Computerphysik	3
1.4	Computersimulationen und wissenschaftliches Rechnen	4

Teil I Computergrundlagen

2	Hard- und Software	9
2.1	Hardware	10
2.2	Software	11
2.2.1	Betriebssysteme	11
2.3	Das Betriebssystem Linux	13
2.3.1	Zur Historie von Linux	13
2.3.2	Die Philosophie von UNIX/Linux	14
2.3.3	GNU-Projekt	14
2.3.4	Linux-Distribution	14
2.3.5	Grafische Oberfläche	15
2.3.6	Terminal	15
3	Arbeiten mit Linux	17
3.1	Die Shell	17
3.1.1	Shell-Kommandos	18
3.1.2	Shell-Variablen und -Aliasse	19
3.1.3	Jobverwaltung	20
3.1.4	Shell-Expansion und Tastaturkürzel	21
3.2	Das Dateisystem	21
3.2.1	Wichtige Verzeichnisse	22
3.2.2	Dateisystem – konkret	23

IX

3.2.3	Zugriffsrechte	24
3.2.4	Ein- und Ausgabeumlenkung	25
3.3	Benutzer und Prozesse	26
3.3.1	Benutzerverwaltung	26
3.3.2	Prozesse	26

Teil II Programmieren und Datenverarbeitung

4	Programmieren in C	31
4.1	Grundlagen der Programmierung	32
4.1.1	<i>Software Engineering</i>	33
4.2	Einführung in C	34
4.2.1	Eigenschaften von C	34
4.2.2	„Hallo Welt!“	35
4.2.3	„Hallo Welt!“-Programm erklärt	36
4.2.4	C-Variablen und -Operatoren	37
4.2.5	Datentypen von C	38
4.2.6	Bedingungen	40
4.2.7	Schleifen	41
4.2.8	Funktionen	42
4.3	C für Fortgeschrittene	44
4.3.1	Zeichen(ketten) und Felder	44
4.3.2	Zusammengesetzte Datentypen	44
4.3.3	Zeiger	46
4.3.4	Dynamische Speicherverwaltung	47
4.4	Hilfsmittel für die Programmierung	49
4.4.1	Kompilieren	49
4.4.2	Fehlersuche	51
4.4.3	Versionsverwaltung	52
5	Programmieren in Python	55
5.1	Allgemeine Informationen zu Python	55
5.2	Die Programmiersprache Python	56
5.2.1	Variablen und Datentypen	56
5.2.2	Kontrollstrukturen	59
5.2.3	Funktionen	60
5.3	Python-Bibliotheken	61
6	Wissenschaftliches Rechnen	63
6.1	Wissenschaftliche Programmierung	63
6.1.1	Datenstrukturen	64
6.1.2	Wichtige Algorithmen	67
6.1.3	Softwarebibliotheken	68

6.2	Datenverarbeitung und -darstellung	71
6.2.1	Datenformate	71
6.2.2	Datenauswertung und -darstellung	74
6.2.3	Matplotlib	75
6.2.4	Weitere Programme	76
6.3	Integrierte Umgebungen und Computeralgebrasysteme	79
6.3.1	Mathematica	79
6.4	Datenaustausch	81
6.4.1	Das OSI-Schichtenmodell	81
6.4.2	Wichtige Dienste	82
6.4.3	SSH	83
7	Hochleistungsrechnen	87
7.1	Optimierung von Programmen	87
7.1.1	Profiling	88
7.2	Parallele Programmierung	90
7.2.1	Vektorisierung	90
7.2.2	OpenMP	91
7.2.3	MPI	92
7.3	HPC-Cluster	95
7.3.1	HPC-Hardware	95
7.3.2	HPC-Systeme	95
7.3.3	<i>Speedup</i>	97
7.3.4	Nutzung von HPC-Clustern	98
 Teil III Numerische Methoden		
8	Zahlendarstellung und numerische Fehler	103
8.1	Darstellung von Zahlen	103
8.1.1	Fließkommadarstellung	105
8.1.2	Fließkommaarithmetik	105
8.2	Numerische Fehler	106
8.2.1	Diskretisierung	106
9	Numerische Standardverfahren	109
9.1	Näherung von Ableitungen	109
9.2	Nullstellensuchverfahren	111
9.2.1	Intervallhalbierung (Bisektion)	111
9.2.2	Newton-Raphson-Verfahren	112
9.2.3	Sekantenverfahren	112
9.2.4	False-Positive-Verfahren (<i>regula falsi</i>)	113
9.2.5	Weitere Verfahren	113

9.3	Interpolation	114
9.3.1	Lineare Interpolation	114
9.3.2	Polynominterpolation	114
9.3.3	Spline-Interpolation	117
9.4	Fourier-Analyse	118
9.4.1	Fourier-Transformation	120
9.4.2	Diskrete Fourier-Transformation	120
9.5	Numerische Integration	122
9.5.1	Newton-Cotes-Formeln	122
9.5.2	Gauß-Quadratur	128
10	Numerik von gewöhnlichen Differenzialgleichungen	133
10.1	Euler-Verfahren	133
10.1.1	Genauigkeit des expliziten Euler-Verfahrens	134
10.2	Runge-Kutta-Verfahren	135
10.3	Mehrschrittverfahren	136
10.4	Implizite Verfahren	137
10.5	Fortgeschrittene Verfahren	138
11	Lineare Algebra	141
11.1	Lineare Gleichungssysteme	141
11.1.1	Exaktes Lösen von LGS	142
11.1.2	Iterative Lösung	144
11.1.3	Software	145
11.2	Eigenwertprobleme	146
11.2.1	Iteratives Lösen von Eigenwertproblemen	147
11.2.2	Software	148
12	Zufallszahlen	151
12.1	Zufallszahlengeneratoren	152
12.1.1	Linearer Kongruenzgenerator	152
12.1.2	Mersenne-Twister	153
12.1.3	Verwendung	153
12.2	Zufallszahlenverteilungen	154
12.2.1	Inversionsmethode	154
12.2.2	Verwerfungsmethode	156
12.2.3	Normalverteilte Zufallszahlen	156
12.2.4	Implementierung	158
 Teil IV Computerphysik-Projekte		
13	Der Oszillator	163
13.1	Physikalische Grundlagen	163
13.2	Numerische Lösung und Tests	164
13.2.1	Implementierung	165
13.2.2	Testen der Ergebnisse	166

13.3	Verbesserte numerische Lösungen	168
13.3.1	Mehrschrittverfahren	168
13.3.2	Leap-Frog-Verfahren	169
13.3.3	Implizite Verfahren	170
13.4	Implementierung der verbesserten Verfahren	171
13.4.1	RK2-Verfahren für den harmonischen Oszillator	171
13.4.2	Die Heun-Methode für den gedämpften Oszillator	171
13.4.3	Verlet-Verfahren zur Lösung der allgemeinen Oszillator- gleichung	173
13.5	Auswertung und analytische Lösung	174
14	Nichtlineare Dynamik	179
14.1	Fraktale und Modellsysteme	180
14.1.1	Die logistische Abbildung	181
14.1.2	Die Mandelbrot-Menge	183
14.1.3	Der Ljapunow-Exponent	184
14.2	Das chaotische Pendel	186
14.2.1	Numerik	187
14.2.2	Auswertung	187
14.3	Seltsame Attraktoren	189
14.3.1	Der Lorenz-Attraktor	190
14.3.2	Der Rössler-Attraktor	190
15	Randwertprobleme	195
15.1	Numerow- und Shooting-Methode	195
15.1.1	Herleitung des Numerow-Verfahrens	196
15.1.2	Einfaches Beispiel	196
15.1.3	Die radiale Poisson-Gleichung	197
15.1.4	Die stationäre Schrödinger-Gleichung	199
15.1.5	Shooting-Methode für den harmonischen Oszillator	201
15.2	Relaxationsmethoden	202
15.2.1	Beispiel	204
15.2.2	Verbesserte Verfahren	205
16	Anfangswertprobleme	209
16.1	Die Diffusionsgleichung	209
16.1.1	FTCS- und BTCS-Verfahren	210
16.1.2	Fehlerabschätzung des FTCS-/BTCS-Verfahrens	211
16.1.3	Crank-Nicholson-Verfahren	211
16.1.4	Stabilitätsanalyse	214
16.1.5	Zweidimensionale Diffusion	215
16.1.6	Ausblick	216

16.2	Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	217
16.2.1	Modenzerlegung	217
16.2.2	Numerische Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung	218
16.2.3	Beispiel: Zeitentwicklung eines Gauß-Paketes	220
16.3	Die Wellengleichung	222
16.3.1	Numerische Lösung der advektiven Gleichung	222
16.3.2	Lax-Wendroff-Verfahren	224
16.3.3	Implementierung	225
17	Eigenwertprobleme	229
17.1	Diagonalisierung	230
17.2	Eigenschwingungen	230
17.3	Anwendungen in der Quantenmechanik	231
17.3.1	Der anharmonische Oszillator	232
17.3.2	Das Doppelmuldenpotenzial	232
17.3.3	Magnetfeldaufspaltung	234
18	Stochastische Methoden	237
18.1	Monte-Carlo-Integration	237
18.1.1	Beispiel: Bestimmung von π	238
18.1.2	Anwendungen	238
18.1.3	<i>Importance Sampling</i>	239
18.2	<i>Random Walk</i>	241
A	Shell-Kommandos unter Linux	243
A.1	Dateikommandos	243
A.2	Kommandos für Benutzer und Prozesse	244
B	Funktionen der C-Standardbibliothek	247
B.1	<stdio.h>	247
B.2	<stdlib.h>	248
B.3	<string.h>	249
B.4	<math.h>	249
B.5	<complex.h>	249
Index		251