

§1 Einleitung: Was ist Computational Physics?

Experiment \longleftrightarrow Theorie (Modell)

analytische Rechnung numerische Rechnung Simulation

Computer in der Physik

- **Simulation**: Löse mikroskopische Bewegungsgleichungen von evtl. vielen Teilchen (MD) oder bilde statistisches Verhalten im Rechner ab (MC).
- **Numerische Analyse**: Nach Reduktion auf wenige Gleichungen werden diese numerisch gelöst, z.B. Eigenwertgleichungen, Selbstkonsistenzgleichungen in Mean-Field- oder Hartree-Fock-Näherungen, EM-Feldberechnungen (Beschleunigerphysik). Häufig sind Programmpakete nützlich: Mathematica, Matlab, Maple etc.
- **Symbolisches Rechnen**: Nicht-numerische Lösungen von DGLn, Integralen, algebraischen Umformungen, Kommutatorrelationen, Störungsrechnung höherer Ordnung; meist mit Programmpaketen, s.o.
- **Analyse und Visualisierung** von (experimentellen oder theoretischen) Daten: Häufig mit universell einsetzbaren Programmpaketen für Grafik und Statistik. Special-purpose-Programme für besonders anspruchsvolle Probleme, z.B. Daten von Pixel-Detektoren als innerste Schicht großer Detektoren am LHC: Eine 100-Megapixel-Kamera, die pro Sekunde 40 Millionen Fotos macht.

Diese Vorlesung: Simulation und numerische Analyse.

Anwendungen in verschiedenen Gebieten der Physik

- Klassische Mechanik
 - Nichtlineare Dynamik mit wenigen Teilchen (z.B. Sonnensystem)
 - Newtonsche Bewegungsgleichungen für viele Teilchen, z.B. in MD-Simulationen
- Elektrodynamik
 - Feldberechnungen in Geometrien, die keine der üblichen Lehrbuch-Symmetrien haben
 - Antennen, Radar
- Hydrodynamik
 - Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen (nichtlineare PDGln)
 - Turbulente Strömungen, Überschallströmungen
- Quantenmechanik
 - (stationäre) Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem nicht-Lehrbuch-Potential
 - Dynamik einfacher Quantensysteme: Ablauf chemischer Reaktionen, Streuprozesse
 - Struktur einfacher Quantensysteme: Moleküle (Grundzustand und angeregte Zustände, Spektren,...)
 - wechselwirkende Vielteilchensysteme in Kern-, Molekül- und Festkörperphysik

- statistische Physik
 - reale Gase jenseits von van der Waals
 - Phasenübergänge und kritische Phänomene
 - biologisch relevante Prozesse, z.B. Proteinfaltung (Sequenz der Aminosäuren → funktional bedeutsame 3D Struktur)
- stochastische Prozesse
 - stochastische DGLn, z.B. Langevin (=Newton mit Zufallskräften)
 - deterministische DGLn für W-Dichten (Fokker-Planck)
 - Finanzprobleme (Black-Scholes-Glg)
 - Sozio- und Öko-Physik
- andere komplexe Systeme
 - Sozio- und Öko-Dynamik, z.B. Modelle für Gerüchte-Verbreitung und Meinungsbildung
 - Dynamik und Evolution von Populationen
 - Wettervorhersage, Klimamodelle

Am Ende sollte immer die Frage stehen, ob man etwas **gelernt** und evtl. sogar **verstanden** hat.

Inhalt (geplant¹)

- 1 Einleitung
- 2 Zahlen und Fehler
- 3 Differentiation und Integration
- 4 Gewöhnliche Differentialgleichungen
- 5 Molekulardynamik (MD) Simulation
- 6 Partielle Differentialgleichungen
- 7 Iterationsverfahren
- 8 Matrixdiagonalisierung, Eigenwertprobleme
- 9 Minimierung
- 10 Zufallszahlen
- 11 Monte-Carlo (MC) Simulation
- 12 Perkolation
- 13 Simulation stochastischer Bewegungsgleichungen

¹Ja mach nur einen Plan! Sei nur ein großes Licht! Und mach dann noch 'nen zweiten Plan; gehn tun sie beide nicht.
(Brecht, Dreigroschenoper).