Übersicht Computational Physics

Table of Contents

[Inhaltsverzeichnis - Kierfeld Skript 2](#_Toc148366427)

[Übungszettel 4](#_Toc148366428)

[Blatt 0 4](#_Toc148366429)

[Blatt 1 4](#_Toc148366430)

[Blatt 2 4](#_Toc148366431)

[Blatt 3 4](#_Toc148366432)

[Blatt 4 4](#_Toc148366433)

[Blatt 5 4](#_Toc148366434)

[Blatt 6 4](#_Toc148366435)

[Blatt 7 4](#_Toc148366436)

[Blatt 8 4](#_Toc148366437)

[Blatt 9 4](#_Toc148366438)

[Blatt 10 5](#_Toc148366439)

# Inhaltsverzeichnis - Kierfeld Skript

1. Zahlen und Fehler
   1. Zahldarstellungen
   2. Benfordsches Gesetz
   3. Fehler
      1. Rundungsfehler
      2. Abbruchfehler
      3. Stabilität
2. Differentiation und Integration
   1. Numerische Differentiation
      1. Erste Ableitung
      2. Zweite Ableitung
   2. Numerische Integration
      1. Trapezregel
      2. Mittelpunktsregel
      3. Simpsonregel
3. Gewöhnliche Differentialgleichungen
   1. Reduktion auf DGL erster Ordnung
   2. Euler-Verfahren, Prädiktor-Korrektor
   3. Runge-Kutta Verfahren
      1. Runge-Kutta 2. Ordnung
      2. Runge-Kutta 4. Ordnung
   4. Schrittweitenanpassung
   5. Integration Newtonscher Bewegungsgleichungen
      1. Verlet-Algorithmen
   6. Implizite Verfahren und steife DGL-Systeme
      1. Implizite Verfahren
      2. Steife DGL-Systeme
   7. Weitere Verfahren
      1. Prädiktor-Korrektor Verfahren höherer Ordnung
      2. Bulirsch-Stoer Verfahren
      3. Programmpakete/Solver
4. Molekulardynamik Simulation (MD)
   1. Grundsätzliches
   2. Kräfte, Randbedingungen, Initialisierung
      1. Kräfte
      2. Randbedingungen
      3. Initialisierung
   3. Integration
   4. Messung von Observablen
      1. Zeitmittel und Äquilibrierung
      2. Energie, Temperatur
      3. Druck
      4. Paarverteilung
      5. Paarverteilung und Virialentwicklung
      6. Nachweis von Phasenübergängen
   5. Kanonische MD Simulation
      1. Isokinetischer Thermostat
      2. Berendsen-Thermostat
      3. Nosé-Hoover Thermostat
5. Partielle Differentialgleichungen
   1. Poisson-Gleichung
      1. 1D Poisson-Gleichung
      2. 2D Poisson-Gleichung
   2. Wellengleichung
   3. Diffusionsgleichung
   4. Schrödingergleichung
6. Iterationsverfahren
   1. Iterationen, Banachscher Fixpunktsatz
   2. Nullstellen, Nichtlineare Gleichungen
      1. Intervallhalbierung
      2. Regula Falsi
      3. Newton-Raphson-Methode
      4. Nullstellen in höheren Dimensionen
   3. Mean-Field Theorien und selbstkonsistente Gleichungen
      1. Hartree-Fock-Näherung
      2. Mean-Field-Theorie des Ising-Modells
   4. Iterationen, Bifurkationen und Chaos
      1. Iteration der Logistischen Abbildung
      2. Fixpunkte, Bifurkationen und Chaos
      3. Selbstähnlichkeit und Universalität
      4. Renormierungsgruppe
   5. Poincaré-Schnitte in chaotischen Systemen
      1. Integrable Systeme
      2. Poincaré-Schnitt
      3. Weg ins Chaos: KAM-Theorem, Poincaré-Birkhoff-Theorem
7. Matrixdisgonalisierung, Eigenwertprobleme
   1. Jacobi-Rotation
   2. Householder und QR-Iteration
      1. Householder-Algorithmus
      2. Eigenwerte und Eigenvektoren tridiagonaler Matrizen
   3. Potenzmethode, Transfermatrix
      1. Potenzmethode
      2. Transfermatrix des 1D Ising-Modells
      3. Google PageRank
   4. Matrixdiagonalisierung in der Quantenmechanik
8. Minimierung
   1. Intervallhalbierung, Goldener Schnitt
   2. Funktion mehrerer Variablen
      1. Konjugierte Richtung
      2. Powell-Verfahren
      3. Steepest Descent
      4. Konjugierte Gradienten
9. Zufallszahlen
   1. Zufallszahlengeneratoren
      1. Echter Zufall
      2. Pseudo-Zufallszahlengeneratoren
      3. Linear kongruente Generatoren
      4. Xorshift und Kombiationen
   2. Erzeugung verschiedener Verteilungen
      1. Transformations- oder Inversionsmethode
      2. Gaußverteilung
      3. Rückweisungsmethode
10. Monte-Carlo Simulation (MC)
    1. Monte-Carlo Integration
       1. Zwei Beispiele
       2. Einfaches Sampling
       3. Importance-Sampling
    2. Markov-Sampling, Metropolis-Algorithmus
       1. Markov-Prozesse, Master-Gleichung
       2. Detailed Balance
       3. Markov-Sampling, Metropolig-Algorithmus
    3. MC Simulation (Bsp. Ising Modell)
       1. Ising-Modell
       2. Metropolis-Algorithmus und Ising-Modell
       3. Aufbau einer MC-Simulation
    4. MC-Simulation kontinuierlicher Systeme
    5. Skalengesetze, Finite-Size-Effekte
       1. Korrelationslänge und Skalengesetze
       2. Finite-Size-Scaling
    6. Cluster-Algorithmen
11. Perkolation
    1. Site- und Bond-Perkolation
       1. Site-Perkolation
       2. Bond-Perkolation
       3. Geschichte und Anwendung
    2. Perkolation als Phasenübergang
       1. Perkolationsschwelle
       2. Cluster-Observablen und kritische Exponenten
    3. Perkolation in D=1
       1. Clusterzahlen
       2. Perkolation in D=1
    4. Potts-Modell und Perkolation
       1. Q-Zustands Potts-Modell
       2. Abbildung auf Perkolation im Limes Q-1
       3. Mean-Field Theorie des Potts-Modells
    5. Simulationsmethoden
       1. Finite-Size-Scaling
       2. Hoshen-Kopelman Algorithmus
12. Simulation stochastischer Bewegungsgleichungen
    1. Brownsche Bewegung, Langevin-Gleichung
       1. Ein Teilchen
       2. N Teilchen
    2. Langevin- und Brownsche Dynamik Simulation
       1. Langevin-Dynamik Simulation
       2. Brownsche Dynamik Simulation
    3. Fokker-Planck-Gleichung
       1. Fokker-Planck-Gleichung (Rayleigh-Gleichung)
       2. Klein-Kramers-Gleichung
       3. Smoluchowski-Gleichung
       4. Numerische Lösung von Fokker-Planck-Gleichungen

# Übungszettel

### Blatt 0

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | Numerische Grundlagen |
| Hello World | 4 | Programmieren |
| Rounding Error | 8 | Rundungsfehler |
| Stability | 8 | Rundungsfehler |

### Blatt 1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | Numerische Integration |
| Numerical differentiation | 8 | Numerische Differentiation |
| Integration routines | 6 | Numerische Integration |
| One-dimensional integrals | 6 | Numerische Integration |

### Blatt 2

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | Numerische Integration |
| Formgleichungen eines flüssigen Tropfens | 10 | Integration (Runge-Kutta) |
| Two-Body problem – Comparison of two integrators | 10 | Integratoren (Verlet, Euler) |

### Blatt 3

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | MD-Simulation, Paar-Korrelation |
| 2D Lennard-Jones-Fluid | 40 | MD, Runge-Kutta, Thermostate |

### Blatt 4

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | PDEs; FTCS vs. Crank-Nickelson |
| Poisson’s equation | 12 | PDEs, Poisson equation |
| Diffusion equation | 8 | PDEs, Diffusion equation |

### Blatt 5

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| Schrödinger equation | 10 | PDEs, Schrödinger equation |
| Oscillating rectangular membrane | 10 | PDEs, wave equations |

### Blatt 6

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| Bifurcation diagrams | 10 | Fixed point, bifurcation, chaos |
| Der Wetterfrosch | 10 | Runge-Kutta, Poincaré cut, fixed point |

### Blatt 7

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| Matrix diagonalization – Power method | 8 | Matrixdiagonalisierung, Eigenwertprobleme |
| Householder with QR Iteration | 12 | Matrixdiagonalisierung, Eigenwertprobleme |

### Blatt 8

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| Linearly congruent random number generators | 10 | LCG, Zufallszahlengenerator |
| Arbitrary distributions | 10 | Sampling Methoden für Zufallszahlen |

### 

### Blatt 9

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | Minimierung |
| One-Dimensional optimization | 9 | Bisection- and Newtons’s method |
| Particle Swarm Optimization | 11 | Minimierung mit evolutionärem Ansatz |

### Blatt 10

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Aufgabe | Punkte | Thema |
| *Comprehension questions* | 0 | Difference MC and MD Simulation, Markov |
| Monte-Carlo Simulation of a Single Spin | 10 | Metropolis, MC |
| Two-Dimensional Ising-Model | 30 | Metropolis, MC |

# Verständnisfragen