

Numerische Methoden in der Physik WS 2013/2014

2 VL (515.421) + 2 UE (515.422)

Lilia Boeri, Christoph Heil und Gernot Kapper

Die Lehrveranstaltungen finden statt:

- VL dienstags, 8 Uhr 30 bis 10 Uhr
Beginn: Dienstag, 1. Oktober 2013
Seminarraum Seminarraum TDK PHEG016
- UE dienstags (gemäß Gruppeneinteilung)
Beginn: Dienstag, 1. Oktober 2013
Computerraum Physik EG

Motivation und Ziel dieser Lehrveranstaltungen

Kennenlernen der wichtigsten Methoden der "Computational Physics" sowie Anwendung dieser Methoden zur Lösung nicht-trivialer physikalischer Probleme.

Vorlesung

Die Vorlesung bietet eine Einführung in die wichtigsten Teilgebiete der *Computational Physics*: Lineare Gleichungssysteme, Interpolation von Punktmengen, Least-Squares Approximation, numerische Integration, Bestimmung von Nullstellen, Eigenwertprobleme, Anfangs- und Randwertprobleme, ...

In Zentrum der Darstellung dieser Methoden stehen die mathematischen Grundideen (ohne detaillierte mathematische Abhandlungen bzw. Beweisführungen) sowie die Erläuterung der Vor- und Nachteile der einzelnen Methoden, ihre numerische Stabilität sowie eine kritische Diskussion der auftretenden Verfahrens- und Rundungsfehler.

Das Wissen um diese Zusammenhänge soll Sie in die Lage versetzen, bei Ihrer zukünftigen numerischen Arbeit aus dem riesigen Software-Angebot die richtige Methode für ein vorliegendes Problem auszuwählen.

Vorlesungsskriptum:

Das VL-Skriptum "Numerische Methoden in der Physik", Ausgabe 2013/2014, kann ab sofort aus dem Internet heruntergeladen bzw. ab dem 1. Oktober 2013.

Prüfung über die Vorlesung:

Prüfungsstoff sind alle Hauptkapitel des Skriptums, welche vorgetragen werden bzw. für die Durchführung der Übungsaufgaben relevant sind.

Übungen

In den Übungen aus "Numerische Methoden in der Physik" sind von den Studierenden vier Übungsbeispiele zu bearbeiten, wobei es seit jeher ein Grundprinzip dieser LV ist, daß der überwiegende Teil der Übungen aus physikalisch interessanten, nicht-trivialen Problemen aus verschiedenen Teilgebieten der Physik besteht.

- Es ist nicht möglich, in den Übungen alle im Vorlesungsskriptum enthaltenen Themen und Methoden "unterzubringen". Dies wird von uns auch gar nicht angestrebt.
- Jede Übung wird in einem kurzen Skriptum vorgestellt, das Sie aus dem Internet herunterladen können. Diese Darstellungen enthalten die folgenden Punkte:
Beschreibung des physikalischen Problems; Hinweise zum numerischen Verfahren; mögliche Programmierprobleme; Testdaten; Hinweise der Darstellung der Ergebnisse (in der Regel grafische Darstellung).

Organisation der Übungen

(vgl. im Internet: *Regeln_fuer_die_Uebungen.tex*)

- Als **Tutoren** werden uns bei den Übungen unterstützen:

Markus Stephan Krammer
markus.krammer@student.tugraz.at

Gernot Kraberger gkraberger@student.tugraz.at

Peter Wriesnik peter.wriesnik@student.tugraz.at

- **Allgemeine Informationen** über den Computerraum Physik im Erdgeschoß des Physikgebäudes erhalten Sie via Internet auf der Seite

<http://www.itp.tu-graz.ac.at/> → **Computer Infrastr.** → **users**

Es erscheint das "Handbuch für Benutzer der Unix und Linux Computer", in dem Sie z.B. nachschlagen können, wie Sie zu einem Account im Computerraum Physik kommen können.

- Die **Gruppeneinteilung** erfolgt in der ersten Übungsstunde am **1. Oktober 2013**.

Ein Grundprinzip der Numerik-Übungen besteht darin, jeder Teilnehmerin und jedem Teilnehmer an dieser Lehrveranstaltung einen eigenen Computer-Arbeitsplatz zu reservieren. Aus diesem Grund werden die Übungen in mehreren Gruppen abgehalten.

- **Software:**
Die PC's im Computerraum Physik sind mit dem Betriebssystem LINUX ausgestattet.
- **Programmiersprache:**
Wahlfreiheit für die Studierenden, soweit es organisatorisch möglich ist!
In der Praxis: C oder die Benutzersprache *MATLAB*.
- **Ein sensibler Punkt der Übungen:** Wie die Erfahrung der letzten Jahre ergeben hat, nützen viele Studierende die Numerik-Übungen dazu, sich eine neue Programmiersprache (in der Regel C) anzueignen; dagegen ist natürlich nichts zu sagen, und die Tutoren leisten dabei Hilfestellung, soweit es zeitlich möglich ist.
Allerdings muß betont werden: die Lehrveranstaltung "Numerische Methoden in der Physik" **ist kein Programmierkurs**. Um Ihnen trotzdem den Einstieg in eine für Sie neue Programmiersprache zu erleichtern, ist das erste der vier Übungsbeispiele – was seinen physikalisch-mathematischen Inhalt betrifft – relativ einfach.
- **Eine große Arbeitserleichterung** für Sie besteht darin, daß alle im Vorlesungsskriptum enthaltenen (weitgehend sprachunabhängigen) Struktogramme als C-Version ins Internet gestellt werden.
- Studierende dieser LV, welche die Übungen mittels **MATLAB** realisieren wollen, können i. a. die speziellen Programme und Funktionen verwenden, die dieses Softwaresystem anbietet. Sie sollten jedoch in diesen Fällen unbedingt zumindest Grundkenntnisse mitbringen, wie sie z. B. in den einschlägigen Lehrveranstaltungen vom Kollegen Kernbichler vermittelt werden.
- In allen Fällen sollten Sie sich die im Vorlesungsskriptum enthaltenen Struktogramme genau ansehen, damit Sie die Funktionsweise dieser Programme verstehen.
- **Voraussetzungen für eine positive Absolvierung der Übungen:**
Über dieses Thema werden wir Sie in der zweiten Vorlesungsstunde bzw. während der Übungsstunden genau informieren.

Auf jeden Fall gelten die beiden folgenden Grundregeln:

1. Die **nachweisliche** Teilnahme an mindestens 10 (von insgesamt 15) Übungsterminen.
2. Die erfolgreiche Präsentation aller 4 Übungsprobleme "direkt am Computer" bis **spätestens 10 März 2014**.

Die Rolle des Internet

in dieser Lehrveranstaltung besteht einerseits in der Gewährleistung einer möglichst optimalen Kommunikation zwischen uns und den Studierenden, andererseits möchten wir Sie motivieren, neben der zur Verfügung gestellten Software auch das große Angebot der (oft kostenlos) übers Internet angebotenen Software zu nutzen:

- Die Internet-Adresse zu der Lehrveranstaltung "Numerische Methoden in der Physik" lautet:

http://www.itp.tu-graz.at/LV/boeri/NUM_METH

Sie erhalten dort die folgenden Informationen:

- Aktuelle Infos, die Vorlesung bzw. die Übungen betreffend.
- Das Vorlesungsskriptum (kapitelweise) im PS- oder im PDF-Format.
- "Mini-Skripten" zu verschiedenen Themen (z.B.: eine knappe LINUX-Einführung, Behandlung spezieller Softwareprobleme, Hinweise zur Grafikdarstellung der Ergebnisse usw.). Diese Infos sind meist einfach ASCII-Files mit Extension .txt
- Materialien zu den einzelnen Übungen (wenn sinnvoll, getrennt für C und MATLAB):
 - Beschreibung der Übung als PS-File,
 - Software mit numerischen Programmen,
 - Testdaten bzw. Daten für das Übungsproblem,
 - Demos zum Übungsthema.
- Wenn Sie (außerhalb der Übungszeiten) mit mir etwas besprechen wollen, kommen Sie zu uns oder schicken Sie uns eine email:

l.boeri@tugraz.at

cheil@sbox.tugraz.at

gernot.kapper@tugraz.at

- Die in der Lehrveranstaltung "Numerische Methoden in der Physik" vorgestellten Struktogramme bzw. Programme sollen Ihnen die wichtigsten Methoden der *Computational Physics* nahebringen. Deshalb sind diese Programme eher didaktisch formuliert als auf Rechengeschwindigkeit optimiert.

Zögern Sie deshalb nicht, bei einer Anwendung von numerischer Software in Ihrer zukünftigen wissenschaftlichen Arbeit auch "Profiprogramme" einzusetzen.

Sie finden im Skriptum am Ende jedes Hauptkapitels einige Informationen darüber, wie Sie das umfangreiche Internet-Angebot an numerischer Software nützen können.