Kapitel 1

Einführung

1.1 Allgemeines

Die Verwendung von Computern wurde, wie in vielen Bereichen des Lebens, auch in der Physik zu einem zentralen Bestandteil sowohl der Ausbildung als auch der Forschung. Die meisten Forschungsbereiche wären heute ohne die Verwendung von Computern und entsprechender Software gar nicht mehr denkbar. Das gilt sowohl für Experimente, deren Steuerung und Auswertung, als auch für die theoretische Behandlung von Problemen bzw. die numerische Simulation von Experimenten.

Die Lehrveranstaltung **Applikationssoftware und Programmierung** wurde im Studienplan der Studienrichtung **Technische Physik** daher bewußt an den Anfang des Studiums gestellt. Die Studierenden sollen dabei mit folgenden Bereichen konfrontiert werden:

- Verwendung von Computern, wie sie im Bereich der Physik üblich ist.
- Kennenlernen der Computerinfrastruktur für Studierende im Bereich der TU-Graz und speziell im Bereich der Physik.
- Kennenlernen und Verwenden von Programmpaketen (Applikationen), die für das weitere Studium nützlich sind (Auswertung und Darstellung von Messungen; numerische Berechnungen; Visualisierung; Präsentation und Dokumentation)
- Informationsbeschaffung aus dem World Wide Web, aus lokalen Dokumentationen oder von ihren Kollegen.
- Grundzüge des Programmierens.

Die Studierenden sollen daher von Anfang an die Möglichkeit erhalten, das für sie bereitgestellte System in vielen Bereichen ihres Studiums zu verwenden. Außerdem

sollen sie auf eine Fülle aufbauender Lehrveranstaltungen bestmöglich vorbereitet sein.

Folgende Lehrveranstaltungen sind stark mit der Benutzung von Computern verbunden:

- Numerische Methoden in der Physik
- Computersimulationen
- Numerische Behandlung von Vielteilchenproblemen
- Computersimulation und Vielteilchenphysik (1 und 2)
- Computersimulation in der Festkörperphysik
- Physik und Simulation des Strahlungstransports
- Applikationssoftware für Fortgeschrittene
- Computermeßtechnik
- Symbolisches Rechnen
- Programmieren in C
- Programmieren in FORTRAN
- Viele Praktika (Experiment und Theorie)
- Viele Ubungen

Die Lehrveranstaltung ist eine Chance, die Möglichkeiten, Hilfen aber auch Grenzen kennenzulernen die Computer in der heutigen Zeit im Bereich der Physikausbildung und der Forschung bieten. Sie dient mehr einer Vermittlung von Fertigkeiten zur Problemlösung als einer Vermittlung von festgeschriebenen Fakten. Damit soll sie zur erfolgreichen Anwendung von Computersoftware während des Physikstudiums hinführen.

Die Lehrveranstaltung beinhaltet nicht:

- Eine allgemeine Einführung in die EDV
- Eine Erklärung der Funktionsweise von Computern
- Konzepte von Betriebssystemen
- Erklärung von Basissoftware (Office Packete, WEB-Browser, ...)

Diese Bereiche werden entweder in ihrer elementaren Form vorausgesetzt oder sind nicht von so großer Wichtigkeit in unserem Umfeld. Fragen dazu an mich oder an Ihre Kollegen sind aber natürlich jederzeit willkommen.

1.2 Organisation der Lehrveranstaltung

Die Lehrveranstaltung gliedert sich in **Vorlesung** und in **Übung** mit praktischen Arbeiten am Computer. Eine getrennte Teilnahme bzw. eine getrennte Prüfung macht keinen Sinn, da jeder Teil für sich genommen etwas isoliert dastehen würde. In der Vorlesung werden sowohl die Grundlagen für die jeweilige Übung vermittelt, als auch die Übung an sich vorgestellt. Damit soll die Bewältigung der Übungsbeispiele erleichtert werden.

1.2.1 Ziel

Die verwendete Programmiersprache ist MATLAB. Das Ziel der Lehrveranstaltung ist die Vermittlung der Grundlagen des Programmierens unter Verwendung von MATLAB. Am Ende der Lehrveranstaltung sollten Sie in der Lage sein, für die Physik relevante Probleme eigenständig zu lösen. Dazu gehören:

- Umsetzen mathematischer Formeln in Computercode
- Auswerten von Messdaten (Ausgleichskurven, Fitten)
- Visualisieren von Ergebnissen
- Erstellen von Programmen
- Verstehen von Programm- und Datenstrukturen
- Verstehen von vektor- und matrixorientierter Programmierung
- Grundlagen von MATLAB und Informationsbeschaffung aus dem englischsprachigen MATLAB-internen Hilfesystem

1.2.2 Anmeldung

Für die Teilnahme an der Vorlesung ist nur das Eintragen in der offiziellen Teilnehmerliste am TUG Online nötig.

Für die Teilnahme an den Übungen sind jedoch folgende Schritte unbedingt notwendig:

- Eintragen in die offizielle Teilnehmerliste (TUG Online).
- Anmeldung für einen Computeraccount auf den Bereichsrechnern für die Studierenden im Bereich "Technische Physik" auf der WEB-Seite des Instituts für Theoretische Physik http://www.itp.tu-graz.ac.at. Dies ist ein von den Subzentren komplett getrenntes System, bei dem die dortige Kombination aus Benutzername und Passwort nicht funktioniert.

• Im Rahmen der ersten Lehrveranstaltung werden wir daher im Computerraum Physik einige Anmelderechner zur Verfügung stellen. Die Passwörter werden sofort ausgeteilt.

1.2.3 Übung

Die Übungen werden im Computerraum Physik abgehalten (siehe 1.3.2). Dieser Raum liegt direkt neben dem Hörsaal P2 im Physikgebäude.

Derzeit sind fünf Gruppen mit jeweils maximal 13 Teilnehmern vorgesehen, da wir von ungefähr 60 Teilnehmern ausgehen. Dabei hat jeder Teilnehmer einen eigenen Computerarbeitsplatz. Bei starker Unter- bzw. Überschreitung dieser Zahl müssen notwendige Maßnahmen diskutiert werden.

Name	Tag	von	bis	Beginn	Ort	Leiter
A	Montag	16:15	17:45	4. März 2002	CR Physik	Kernbichler
В	Montag	18:00	19:30	4. März 2002	CR Physik	Kernbichler
C	Mittwoch	08:15	09:45	6. März 2002	CR Physik	Prüll
D	Mittwoch	17:00	18:30	6. März 2002	CR Physik	Prüll
E	Mittwoch	15:15	16:45	6. März 2002	CR Physik	Koller

Übungen haben immanenten Prüfungscharakter, das heißt, eine **Teilnahme** an den einzelnen Übungsstunden ist **verpflichtend** (siehe auch 1.2.6). Wenn Sie eine andere Lösung benötigen bzw. verhindert sind, kontaktieren Sie unbedingt den jeweiligen Übungsleiter.

1.2.4 Beginn

Durch die dienstlich bedingte Abwesenheit von Kernbichler/Prüll/Koller in der ersten Vorlesungswoche und von Kernbichler auch in der zweiten Woche haben wir uns zu folgendem Ablauf entschieden.

Datum	Beginn	Titel	Ort	Leiter
25.2.2002	14:15	Accountvergabe	HS P2 / CR Physik	Tutoren
4.3.2002	14:15	Einführung	HS P2	Prüll/Koller
4.3.2002	16:15	Einführungsübung A	CR Physik	Prüll/Koller
4.3.2002	18:00	Einführungsübung B	CR Physik	Prüll/Koller
6.3.2002	8:15	Einführungsübung C	CR Physik	Prüll
6.3.2002	17:00	Einführungsübung D	CR Physik	Prüll
6.3.2002	15:15	Einführungsübung E	CR Physik	Koller

Die Einführung und die zugehörige Übung sollen Sie mit dem Computersystem, dem Betriebssystem LINUX und der Programmumgebung von MATLAB vertraut machen.

Ab der darauffolgenden Woche finden alle Lehrveranstaltungen planmäßig statt.

1.2.5 Unterlagen und Dokumentation

Dieses Dokument wird laufend aktualisiert und soll jederzeit über die WEB-Seite des Instituts für Theoretische Physik www.itp.tu-graz.ac.at abrufbar sein. Ein dar- über hinaus gehendes Skriptum wird es wegen der Schnelligkeit der Entwicklung am Computer- und Softwaresektor nicht geben. Wir werden aber eine Reihe von Dokumenten und Hilfssystemen über die oben genannte WEB-Seite anbieten.

Die gesamte MATLAB Dokumentation ist verfügbar unter

http://www.itp.tu-graz.ac.at/matlabhelpdesk.html.

Der Zugang zu vielen Büchern im sogenannten "Portable Document Format - pdf" findet sich ebenfalls auf diesem Server

http://www.itp.tu-graz.ac.at/matlabhelpdesk.html.

1.2.6 Prüfungen

Da der Schwerpunkt dieser Lehrveranstaltung nicht die Vermittlung von Fakten ist, sondern hier der Zugang zu Problemlösungen mit Hilfe von Computern erleichtert werden soll, ist auch das Prüfen von Fakten nicht das erklärte Ziel. Entscheidend hingegen ist, welche Kompetenz Sie bei der Lösung von Problemen an den Tag legen. Dazu sind jeweils alle Hilfsmittel (Unterlagen, Fragen, Hilfssysteme, Internet, ...) erlaubt. Diese Vorgangsweise soll eher eine Problemlösung während des Studiums oder während der Forschung simulieren.

Es soll hier nochmals darauf hingewiesen werden, dass eine Teilnahme an allen Übungseinheiten notwendig ist, außer es wurden andere Vereinbarungen mit uns getroffen. Bei Verhinderung ersuchen wir um eine Absage z.B. durch eine E-mail an den Übungsleiter.

Die Grundvoraussetzung für die Ablegung der Abschlussprüfung ist die Abgabe **aller Übungsbeispiele** auf elektronischem Weg. Für die Abgabe der Übungsbeispiele ist eine Frist von jeweils 2 Wochen vorgesehen. Genaue Daten dazu werden jeweils vorgegeben. Die Übungsbeispiele werden von einem Tutor korrigiert, eine Rückmeldung wird direkt über ein Computerprogramm erfolgen.

Für einen Abschluss der Lehrveranstaltung bieten wir folgende Möglichkeiten an:

- Aktive Teilnahme an den Übungen und Abgabe aller Beispiele. Teilnahme an einem Prüfungstermin am Computer, Lösung von Problemen unter Zuhilfenahme aller Unterlagen. Prüfungsgespräch mit dem Vortragenden direkt nach Abgabe.
- Durchführung von Projektarbeiten im Umfeld der Lehrveranstaltung. Das Thema kann bzw. sollte bevorzugt aus Ihrem Interessensgebiet oder aus einer anderen Lehrveranstaltung stammen und mit hier besprochenen Methoden behandelt werden. Ergebnisse können dann auch auf unserer WEB-Seite präsentiert werden. In diesem Fall muss nicht unbedingt an den Übungen teilgenommen werden. Eine vorherige Absprache ist aber unbedingt erforderlich. Diese Möglichkeit richtet sich vor allem an Hörer, die bereits gute Kenntnisse in MATLAB haben.

Von den Vortragenden und Betreuern wird angestrebt, dass ein Großteil der Studierenden die Lehrveranstaltung am Ende des Semesters noch vor den Ferien mit einem positiven Zeugnis abschließen kann. Es wird aber nochmals darauf hingewiesen, dass die **aktive Teilnahme** an den Übungen und die selbstständige Lösung der Übungsbeispiele eine Voraussetzung dafür ist. Termine und genauere Anforderungen werden rechtzeitig vor Ende des Semesters bekanntgegeben.

1.2.7 Sprache

Die Vortragssprache ist Deutsch. Viele Dokumentationen und Beschreibungen bzw. das Hilfesystem von viele Programmen ist aber natürlich in Englisch. Dadurch wird die Benutzung beider Sprachen notwendig.

1.3 Computerzugang für Studierende

Da wir für unsere gemeinsame Arbeit Zugang zu Computern (oder, falls eigene Computer vorhanden sind, Zugang zum TU-Netz) brauchen, habe ich in der Folge einige interessante Fakten zusammengestellt. Nähere Informationen dazu finden Sie auf der WEB-Seite des Zentralen Informatik Dienstes unter http://www.zid.tu-graz.ac.at bzw. unter http://www.vc-graz.ac.at.

Im Bereich der Physik finden Sie Informationen unter:

- http://www.itp.tu-graz.ac.at
- http://fubphpc.tu-graz.ac.at.

1.3.1 Computerzugang an der TU Graz

1.3.1.1 Subzentren

Für die Ausbildung der Studierenden in und mit EDV stellt der Zentrale Informatik Dienst (ZID) in den einzelnen Gebäudekomplexen der TU Graz Computerarbeitsplätze für die Lehre zur Verfügung. Die EDV-Ausbildungsräume sind mit insgesamt mehr als 150 Arbeitsplatzrechnern ausgestattet.

Die EDV-Ausbildungsräume können für Lehrveranstaltungen, Übungen, Seminare usw. genutzt werden. In den übrigen Zeiten stehen die Rechner den Studierenden zur freien Benutzung zur Verfügung.

Öffnungszeiten und Betreuung

Die EDV Ausbildungsräume sind während der Vorlesungszeiten in der Regel von Montag bis Freitag in der Zeit von 8:00 - 21:30 Uhr (Ausnahme Inffeldgasse 25/EG 8:00 - 19:30 Uhr) geöffnet. In den Ferien und vorlesungsfreien Zeiten gelten eingeschränkte Öffnungszeiten. Üblicherweise sind in diesen Zeiten die Subzentren Kopernikusgasse 24/3. Stock und Rechbauerstrasse 12/2. Stock geöffnet. Die aktuellen Öffnungszeiten können auch den Aushängen in den EDV Ausbildungsräumen und den Informationen des Zentralen Informatikdienstes entnommen werden.

Beim Betrieb der EDV Ausbildungsräume werden die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des ZID durch Betreuerinnen bzw. Betreuer unterstützt, die täglich zu festgelegten Zeiten in den EDV Ausbildungsräumen anwesend sind. Diese sorgen für den laufenden Betrieb, betreuen die Peripherie wie Drucker und Plotter und kümmern sich um Hard- und Softwareprobleme. Eine ihrer wichtigsten Funktionen ist die Unterstützung der Studierenden, die damit eine Ansprechperson für Fragen und Probleme direkt vor Ort vorfinden. In den nicht betreuten Zeiten steht eine zentrale e-mail-Adresse service@subedvz.tu-graz.ac.at zur Verfügung, an die Hardware- und Softwareprobleme gemeldet und Fragen gerichtet werden können.

Benutzung der EDV-Ausbildungsräume

Es gelten die Richtlinien für die Benutzung der EDV Benutzerräume (EDV Subzentren).

Die EDV Räumlichkeiten des Zentralen Informatikdienstes sind tagsüber für Angehörige der TU Graz frei zugänglich. Für die Benutzung der Ausbildungsrechner in den EDV Ausbildungsräumen benötigen alle Studierenden einen persönlichen Benutzernamen. Dieser kann von jeder/jedem Studierenden der TU Graz mit dem zugesandten PIN-Code (siehe unten) selbst eingerichtet werden. Damit können die Ausbildungsrechner von allen Studierenden der TU-Graz - und nur von ihnen - benutzt werden.

Die Benutzernamen für Studierende ermöglichen die Verwendung der öffentlich zugänglichen Ausbildungsrechner in den EDV Ausbildungsräumen und der dort installierten Software und sind auch für die Benutzung der Rechner im Rahmen von

EDV Lehrveranstaltungen, Übungen, Seminaren usw. unbedingt nötig. Außerdem wird ein Speicherbereich am Server reserviert, auf dem Studierende eigene Daten ablegen können. Auch Internet-Dienste wie E-Mail, Usenet News, File-Transfer (ftp), remote login auf andere Rechner (telnet), Zugriff auf Informationssysteme (WWW) stehen damit allen Studierenden offen.

1.3.2 Computer für Studierende im Bereich Physik

Der Bereich Physik hat im Bereich der studentischen Ausbildung eine Sonderstellung. Für unsere speziellen Bedürfnisse steht ein eigener Computerraum zur Verfügung.

Die Ausstattung besteht aus 15 Workstations für Studierende, an denen auch in Zweiergruppen gearbeitet werden kann. Für den Vortragenden besteht ein eigener Platz mit Projektionsmöglichkeiten direkt vom Rechner aus. Damit sollte eine Gruppengröße von 15 bzw. 30 (in Zweiergruppen) Studierenden möglich sein.

Die Computer sind mit den Betriebssystemen LINUX und der gesamten relevanten Software ausgestattet. Vorgesehen ist die Verwendung sowohl für Übungen als auch für die gesamte studentische Arbeit an Computern. Durch die Verwendung des Betriebssystems LINUX ist auch eine Verwendung von Programmen von außerhalb (siehe externer Zugang) möglich. Bei einigen Rechnern steht auch das Betriebssystem WINDOWS NT als Gastbetriebssystem zur Verfügung (Office, ...). Die Lehrveranstaltungen werden aber zur Gänze unter LINUX abgewickelt

Für dieses Computersystem ist eine getrennte Anmeldung über die WEB-Seite des Instituts für Theoretische Physik www.itp.tu-graz.ac.at unbedingt erforderlich. Hier ist im Gegensatz zu den Subzentren keine freie Wahl des Passwortes möglich, das Passwort wird Ihnen nach der Anmeldung ausgehändigt. Weitere Informationen über dieses Computersystem finden sie auf der WEB-Seite http://fubphpc.tu-graz.ac.at.

Anders als in den Subzentren stehen die Rechner rund um die Uhr zur Verfügung. Das einzige Problem dabei ist der Zugang zum Physikgebäude.

Wir haben uns bemüht einige interessante Manuals zusammenzustellen, insbesondere auch eine kurze .Einführung in LINUX

1.3.3 Externer Zugang über ISDN, Modem, Virtual Campus oder Telekabel

Der Zentrale Informatikdienst der TU Graz bietet für die Angehörigen der TU (Mitarbeiter und Studierende) einen externen Zugang in das TUGnet mit Modem Verbindung oder ISDN-Verbindung an. Für die Bewohner diverser Studentenheime gibt es die Möglichkeit via Netzwerk am sogenannten "Virtual Campus" teilzunehmen. Die

Firma Telekabel bietet einen verbilligten Zugang für Studierende über Kabel-Modem an.

Unabhängig vom gewählten Internetprovider kann man sich auf unseren LINUX-Rechnern anmelden bzw. Daten von und zu diesen Rechnern transferieren. Gängige Protokolle dafür sind

Protokoll	Beschreibung	Sicherheit	
ssh	Secure Shell	Verschlüsselt	
telnet	Terminal Kommunikation	Unverschlüsselt	
scp	Secure Copy	Verschlüsselt	
ftp	File Transfer	Unverschlüsselt	
rsync	Synchronisieren	Verschlüsselung möglich	

Zu all diesen Protokollen gibt es Clients auf allen Betriebssystemen. Eine wirkliche Hilfe von uns in Installationsfragen kann es aber nicht geben. Unsere Unterstützung beschränkt sich auf die Bereitstellung der Dienste auf Serverseite auf allen Rechnern. Dies sind die Rechner fubphpcxx.tu-graz.ac.at, wobei xx für die Zahlen 01 bis 16 mit Ausnahme von 09 steht.

Um auch Grafik übertragen zu können, braucht man eine X-Windows Server Software. Auch die gibt es für alle Betriebssysteme.

1.4 Kommunikation

Neben der Kommunikation während und nach den Vorlesungen und Übungen, sollte vor allem die Kommunikation über Electronic Mail stattfinden. Ich bin unter meiner Mail-Adresse kernbichler@itp.tu-graz.ac.at zu erreichen.

Eine Übungsgruppe wird Herr Dipl.-Ing. Alexander Prüll betreuen. Er ist unter der Adresse **pruell@itp.tu-graz.ac.at** zu erreichen.

Außerdem gibt es für die Übungen zwei Tutoren: Dieter Mayer, dieter.mayer@itp.tu-graz.ac.at, und Oliver Teschl, teschl@fubphpc.tu-graz.ac.at.

Die studentischen Betreuer unserer Computeranlage sind Andreas Hirczy, erreichbar unter hirczy@itp.tu-graz.ac.at, und Christian Pfaffel, erreichbar unter pfaffel@itp.tu-graz.ac.at.

1.5 Dokumente

Dieses Dokument kann als PDF Datei von unserem Server geladen werden.

Die Erstellung dieses Dokuments und auch der appsoft1_talk.pdf erfolgt mit pdflatex, einem Programm zum Erzeugen von PDF-Dateien direkt aus der Typesetting-Sprache LATEX.

In Zukunft werden hier noch weitere Referenzen zu interessanten Dokumenten angeboten werden.

1.6 Programmpakete

Der Schwerpunkt unserer Arbeit wird auf dem Programmpaket MATLAB basieren. Der Name steht für MATrix LABoratory und bezieht sich auf eine herausragende Eigenschaft von MATLAB, nämlich die Fähigkeit fast alle Befehle auf Vektoren bzw. Matrizen anwenden zu können.

Das Paket ist gleichzeitig:

- eine Art Taschenrechner auch für Vektoren und Matrizen
- eine Programmiersprache
- ein Compiler
- ein mächtiges Programm zur Visualisierung
- ein Tool zur Erstellung von Graphical User Interfaces (GUI)
- erweiterbar durch Toolboxen zu den verschiedensten Themenbereichen
- ein graphisches Werkzeug zur Simulation von komplexen Abläufen (SIMULINK)
- eine Schnittstelle zu symbolischen Rechenprogrammen (MAPLE)
- eine Schnittstelle zu anderen Programmiersprachen (C, FORTRAN)

In Ergänzung dazu wird auf Seite der symbolischen Programmpakete MAPLE vorgestellt werden. Dabei werden wir uns maximal mit wenigen Grundzügen bschäftigen bzw. die Verbindung zwischen MATLAB und MAPLE kennenlernen.

Numerischen Programme wie MATLAB und symbolische Programme wie MAPLE oder MATHEMATICA unterscheiden sich in folgendem Punkt:

MATLAB Numerische Programme arbeiten mit Zahlenwerten, das heißt, einer Variablen muss ein Wert zugewiesen werden, x=1:10 (Vektor der Zahlen 1 bis 10), und dann können Operationen darauf angewandt werden, z.B.: $y=\sin(x)$. Resultate liegen daher immer "numerisch" vor und sind mit der inhärenten Ungenauigkeit von numerischen Darstellungen behaftet. Numerische Programme

haben daher ihre Bedeutung bei einer großen Anzahl "symbolisch" nicht lösbarer Probleme bzw. bei der Verarbeitung von numerisch vorliegenden Daten (Messdaten, ...).

MAPLE Symbolische Programme hingegen arbeiten mit Variablen, denen keine numerischen Werte zugewiesen sind. Hier liefert z.B. die Eingabe y=int(x^2,x) das Ergebnis $y=x^3/3$. Danach können dann bei Bedarf Werte für x eingesetzt werden. "Lösbare" Probleme können daher auf exakte Art und Weise gelöst werden.

Der Unterschied sei hier am Beispiel der Differentiation erklärt. In einem symbolischen Rechenprogramm kann die Differentiation exakt ausgeführt werden, falls eine Lösung existiert

$$\frac{d}{dx}\sin x = \cos x \ . \tag{1.1}$$

In der Numerik hingegen liegen Zahlenwerte, z.B. in Form eines Vektors vor

$$\mathbf{x}\mathbf{v} = [x_1, x_2, \dots, x_n] , \qquad (1.2)$$

wobei n die Anzahl der Elemente im Vektor xv ist. Mit dem Befehl

$$\mathbf{y}\mathbf{v} = \sin(\mathbf{x}\mathbf{v}) , \mathbf{y}\mathbf{v} = [y_1, y_2, \dots, y_n] , \qquad (1.3)$$

kann man nun einen Vektor yv der gleichen Länge n erzeugen. Die Differentiation kann jetzt aber nur näherungsweise mit Hilfe des Differenzenquotienten

$$\frac{d}{dx}\sin x \approx \frac{\Delta\left(\sin x\right)}{\Delta x} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i},$$
(1.4)

erfolgen.

Diese Vorgangsweise mag hier unlogisch erscheinen, sie funktioniert aber auch dann, wenn überhaupt kein funktionaler Zusammenhang bekannt ist (z.B.: Messdaten) oder wenn ein Problem nicht exakt lösbar ist. In der Realität ist deshalb eine numerische Behandlung von Problemen häufig notwendig. Man muss sich aber natürlich immer im Klaren sein, dass die Numerik mit Ungenauigkeiten behaftet ist.