

Inhaltsverzeichnis

Vorwort, v

Vorwort zu der FORTRAN-Version, ix

Hinweise zur Benutzung des Buches, xi

Kapitel 5: Matrixoperationen, 1

5.1 Inversion einer Matrix, 1

5.2 Eigenwerte einer tridiagonalen Matrix, 5

5.3 Reduktion einer Matrix auf Tridiagonalgestalt, 8

5.4 Bestimmung der Ladungsverteilung in Atomkernen, 14

Projekt V: Ein schematisches Schalenmodell, 30

V.1 Definition des Modells, 30

V.2 Die exakten Eigenzustände, 32

V.3 Approximative Eigenzustände, 36

V.4 Lösung des Modells, 41

Kapitel 6: Elliptische Partielle Differentialgleichungen, 43

6.1 Diskretisierung und das Variationsprinzip, 46

6.2 Iterative Lösungsmethoden für Randwertprobleme, 50

6.3 Mehr über Diskretisierungen, 54

6.4 Elliptische Gleichungen in zwei Dimensionen, 57

Projekt VI: Stationäre Hydrodynamik in zwei Dimensionen, 59

VI.1 Die Gleichungen und ihre Diskretisierung, 59

VI.2 Die Randbedingungen, 64

VI.3 Lösung der Gleichungen, 67

Kapitel 7: Parabolische Partielle Differentialgleichungen, 71

7.1 Naive Diskretisierung und das Auftreten von Instabilitäten, 72

7.2 Implizite Verfahren und die Inversion tridiagonaler Matrizen, 77

7.3 Diffusions- und Randwertprobleme in zwei Dimensionen, 82

7.4 Iterative Lösungsmethoden für Eigenwertprobleme, 84

7.5 Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung, 90

Projekt VII: Selbstorganisation in chemischen Reaktionen, 94

VII.1 Beschreibung des Modells, 94

VII.2 Lineare Stabilitätsanalyse, 96

VII.3 Numerische Lösung des Modells, 99

Kapitel 8: Monte-Carlo-Verfahren, 101

8.1 Grundlagen der Monte-Carlo-Strategie, 102

8.2 Erzeugung von Zufallszahlen nach einer bestimmten Verteilungsfunktion, 110

8.3 Der Metropolis-Algorithmus, 117

8.4 Das zweidimensionale Ising-Modell, 123

Projekt VIII: Untersuchung des Wasserstoffmoleküls mit Monte-Carlo-Methoden, 130

VIII.1 Formulierung der Problemstellung, 130

VIII.2 Monte-Carlo-Variationsverfahren und die Testfunktion, 132

VIII.3 Monte-Carlo-Berechnung der exakten Grundzustandsenergie, 135

VIII.4 Lösung des Problems, 140

Anhang A: Hinweise zur Benutzung der Programme, 143

A.1 Installierung der Programme, 143

A.2 Files, 144

A.3 Übersetzung der Programme, 146

A.4 Ausführung, 148

A.5 Graphik, 150

A.6 Programmstruktur, 152

A.7 Menustruktur, 153

A.8 Änderung von Defaultwerten, 156

Anhang B: Programme für die Beispiele, 157

B.5 Beispiel 5, 157

B.6 Beispiel 6, 188

B.7 Beispiel 7, 225

B.8 Beispiel 8, 249

Anhang C: Programme für die Projekte, 271

C.5 Projekt V, 271

C.6 Projekt VI, 293

C.7 Projekt VII, 324

C.8 Projekt VIII, 351

Anhang D: Allgemeine Hilfsprogramme, 381

D.1 Hardware- und compilerabhängige Programme, 381

D.2 Allgemeine Eingabe/Ausgabe-Programme, 387

D.3 Graphik-Programme, 415

Anhang E: Graphikpaket für den Personalcomputer, 441

E.1 Hilfsprogramme für die PC-Graphik, 444

E.2 Graphik-Programme für den Personalcomputer, 469

Literaturverzeichnis, 489

Stichwortverzeichnis, 495

Das Problem im Umgang mit Computern ist, daß sie nur Antworten geben.

—Pablo Picasso zugeschrieben