

# Inhalt

- 1 Einführung — 1**
  - 1.1 Ziel, Inhalt und Aufbau — 1
  - 1.2 Die notwendige Umgebung zur Programmentwicklung — 3
    - 1.2.1 Betriebssystem — 3
    - 1.2.2 Software-Pakete — 5
    - 1.2.3 Grafik — 5
    - 1.2.4 Programmentwicklung und einfaches Skript — 5
  - 1.3 Ein erstes Beispiel – Die Logistische Abbildung — 6
    - 1.3.1 Abbildung — 6
    - 1.3.2 Programm — 7
    - 1.3.3 Aufgaben — 9
  
- 2 Abbildungen — 11**
  - 2.1 Frenkel–Kotorova-Modell — 11
    - 2.1.1 Klassische Formulierung — 11
    - 2.1.2 Stationäre Lösungen — 12
    - 2.1.3 Standardabbildung — 12
    - 2.1.4 Aufgaben — 13
  - 2.2 Chaos und Lyapunov-Exponenten — 13
    - 2.2.1 Stabilität, Schmetterlingseffekt und Chaos — 14
    - 2.2.2 Lyapunov-Exponent der Logistischen Abbildung — 14
    - 2.2.3 Lyapunov-Exponenten mehrdimensionaler Abbildungen — 16
  - 2.3 Affine Abbildungen und Fraktale — 20
    - 2.3.1 Sierpinski-Dreieck — 20
    - 2.3.2 Von Farnen und anderen Gewächsen — 22
    - 2.3.3 Aufgaben — 23
  - 2.4 Fraktale Dimension — 23
    - 2.4.1 Box Counting — 23
    - 2.4.2 Beispiel Sierpinski-Dreieck — 24
    - 2.4.3 Aufgabe — 26
  - 2.5 Neuronale Netze — 26
    - 2.5.1 Perzeptron — 26
    - 2.5.2 Selbstorganisierte Karten: das Modell von Kohonen — 33
    - 2.5.3 Aufgaben — 36
  
- 3 Dynamische Systeme — 39**
  - 3.1 Quasilineare Differentialgleichungen — 39
    - 3.1.1 Beispiel: Logistische Abbildung und Logistische DGL — 40
    - 3.1.2 Aufgaben — 41

3.2	Fixpunkte und Instabilitäten — 42
3.2.1	Fixpunkte — 42
3.2.2	Stabilität — 42
3.2.3	Trajektorien — 43
3.2.4	Gradientendynamik — 44
3.2.5	Spezialfall $N = 1$ — 44
3.2.6	Spezialfall $N = 2$ — 44
3.2.7	Spezialfall $N = 3$ — 46
3.3	Hamilton'sche Systeme — 48
3.3.1	Hamilton-Funktion und kanonische Gleichungen — 49
3.3.2	Symplektische Integratoren — 50
3.3.3	Poincaré-Abbildung — 55
<b>4</b>	<b>Gewöhnliche Differentialgleichungen I — 59</b>
4.1	Newton'sche Mechanik — 59
4.1.1	Bewegungsgleichungen — 59
4.1.2	Das mathematische Pendel — 60
4.2	Numerische Verfahren niedrigster Ordnung — 61
4.2.1	Euler-Verfahren — 61
4.2.2	Numerische Stabilität des Euler-Verfahrens — 63
4.2.3	Implizite und explizite Verfahren — 64
4.3	Verfahren höherer Ordnung — 65
4.3.1	Verfahren von Heun — 65
4.3.2	Aufgabe: Crank–Nicolson-Verfahren — 68
4.3.3	Runge–Kutta-Verfahren — 68
4.4	RK4-Anwendung: Himmelsmechanik — 74
4.4.1	Kepler-Problem: geschlossene Planetenbahnen — 74
4.4.2	Quasiperiodische Planetenbahnen, Periheldrehung — 77
4.4.3	Mehrere Planeten: Ist unser Sonnensystem stabil? — 77
4.4.4	Das reduzierte Drei-Körper-Problem — 80
4.5	Molekulare Dynamik (MD) — 87
4.5.1	Klassische Formulierung — 87
4.5.2	Randbedingungen — 88
4.5.3	Mikrokanonisches und kanonisches Ensemble — 89
4.5.4	Algorithmus — 90
4.5.5	Auswertung — 91
4.5.6	Aufgaben — 95
4.6	Chaos — 96
4.6.1	Harmonisch angetriebenes Pendel — 97
4.6.2	Poincaré-Schnitt und Bifurkationsdiagramm — 98
4.6.3	Lyapunov-Exponenten — 99

- 4.6.4 Fraktale Dimension — 108
- 4.6.5 Rekonstruktion von Attraktoren — 110
- 4.7 DGLs mit periodischen Koeffizienten — 112
- 4.7.1 Floquet-Theorem — 112
- 4.7.2 Stabilität von Grenzzyklen — 113
- 4.7.3 Parametrische Instabilität: Pendel mit oszillierendem Aufhängepunkt — 114
- 4.7.4 Mathieu-Gleichung — 116
- 4.7.5 Aufgaben — 117
  
- 5 Gewöhnliche Differentialgleichungen II — 119**
- 5.1 Vorbemerkungen — 119
- 5.1.1 Randbedingungen — 119
- 5.1.2 Beispiel: Der schiefe Wurf — 120
- 5.2 Finite Differenzen — 121
- 5.2.1 Diskretisierung — 121
- 5.2.2 Beispiel Schrödinger-Gleichung — 124
- 5.3 Methode der gewichteten Residuen — 129
- 5.3.1 Verschiedene Verfahren — 129
- 5.3.2 Beispiel Stark-Effekt — 131
- 5.4 Nichtlineare Randwertprobleme — 133
- 5.4.1 Nichtlineare Systeme — 133
- 5.4.2 Newton-Raphson — 134
- 5.4.3 Beispiel: nichtlineare Schrödinger-Gleichung — 136
- 5.4.4 Beispiel: Flug zum Mond — 139
- 5.5 Schießverfahren — 142
- 5.5.1 Die Methode — 142
- 5.5.2 Beispiel: senkrechter Fall mit quadratischer Reibung — 143
- 5.5.3 Gleichungssysteme — 144
- 5.5.4 Aufgaben — 145
  
- 6 Partielle Differentialgleichungen I, Grundlagen — 147**
- 6.1 Klassifizierung — 147
- 6.1.1 PDGL 1. Ordnung — 147
- 6.1.2 PDGL 2. Ordnung — 150
- 6.1.3 Rand- und Anfangsbedingungen — 152
- 6.2 Finite Differenzen — 155
- 6.2.1 Diskretisierung — 156
- 6.2.2 Elliptische PDGL, Beispiel Poisson-Gleichung — 159
- 6.2.3 Parabolische PDGL, Beispiel Wärmeleitungsgleichung — 165
- 6.2.4 Hyperbolische PDGL, Beispiel Konvektionsgleichung, Wellengleichung — 170

- 6.3           Andere Diskretisierungsverfahren — 176
- 6.3.1        Chebyshev-Spektralmethode — 177
- 6.3.2        Spektral-Methode mittels Fourier-Transformation — 181
- 6.3.3        Finite-Elemente-Methode — 185
- 6.4           Nichtlineare PDGL — 190
- 6.4.1        Reelle Ginzburg–Landau-Gleichung — 190
- 6.4.2        Numerische Lösung, explizites Verfahren — 191
- 6.4.3        Numerische Lösung, semi-implizites Verfahren — 193
- 6.4.4        Aufgaben — 194
  
- 7            **Partielle Differentialgleichungen II, Anwendungen — 197**
- 7.1           Quantenmechanik in einer Dimension — 197
- 7.1.1        Stationäre Zweiteilchengleichung — 197
- 7.1.2        Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung — 200
- 7.2           Quantenmechanik in zwei Dimensionen — 206
- 7.2.1        Schrödinger-Gleichung — 206
- 7.2.2        Algorithmus — 207
- 7.2.3        Auswertung — 207
- 7.3           Hydrodynamik inkompressibler Strömungen — 208
- 7.3.1        Grundgleichungen — 208
- 7.3.2        Beispiel: Driven Cavity — 211
- 7.3.3        Thermische Konvektion: (A) quadratische Geometrie — 215
- 7.3.4        Thermische Konvektion: (B) Rayleigh–Bénard-Konvektion — 221
- 7.4           Strukturbildung fern vom Gleichgewicht — 228
- 7.4.1        Reaktions-Diffusions-Systeme — 228
- 7.4.2        Swift–Hohenberg-Gleichung — 236
- 7.4.3        Aufgaben — 240
  
- 8            **Monte Carlo-Verfahren (MC) — 243**
- 8.1           Zufallszahlen und Verteilungen — 243
- 8.1.1        Zufallszahlengenerator — 243
- 8.1.2        Verteilungsfunktion, Wahrscheinlichkeitsdichte, Erwartungswert — 244
- 8.1.3        Andere Verteilungsfunktionen — 245
- 8.2           Monte Carlo-Integration — 249
- 8.2.1        Integrale in einer Dimension — 249
- 8.2.2        Integrale in mehreren Dimensionen — 251
- 8.3           Anwendungen aus der Statistischen Physik — 253
- 8.3.1        Zweidimensionales klassisches Gas — 254
- 8.3.2        Das Ising-Modell — 259

- 8.4 Differentialgleichungen als Variationsproblem — 269
- 8.4.1 Diffusionsgleichung — 269
- 8.4.2 Swift–Hohenberg-Gleichung — 271

## **A Matrizen und lineare Gleichungssysteme — 275**

- A.1 Reelle Matrizen — 275
  - A.1.1 Eigenwerte und Eigenvektoren — 275
  - A.1.2 Charakteristisches Polynom — 275
  - A.1.3 Bezeichnungen — 276
  - A.1.4 Normale Matrizen — 276
- A.2 Komplexe Matrizen — 277
  - A.2.1 Bezeichnungen — 277
  - A.2.2 Die Jordan'sche Normalform — 278
- A.3 Inhomogene lineare Gleichungssysteme — 279
  - A.3.1 Reguläre und singuläre Systemmatrizen — 279
  - A.3.2 Fredholm'sche Alternative — 280
  - A.3.3 Reguläre Matrizen — 280
  - A.3.4 LR-Zerlegung — 281
  - A.3.5 Thomas-Algorithmus — 283
- A.4 Homogene lineare Gleichungssysteme — 284
  - A.4.1 Eigenwertproblem — 284
  - A.4.2 Problemstellung — 285
  - A.4.3 Anwendung: Nullstellen eines Polynoms — 287

## **B Programm-Library — 289**

- B.1 Routinen — 289
- B.2 Grafik — 290
  - B.2.1 init — 290
  - B.2.2 contur — 290
  - B.2.3 contur1 — 290
  - B.2.4 ccontu — 290
  - B.2.5 image — 291
  - B.2.6 ccircl — 291
- B.3 Runge–Kutta — 291
  - B.3.1 rkg — 291
  - B.3.2 drkg — 291
  - B.3.3 drkadt — 291
- B.4 Sonstiges — 292
  - B.4.1 tridag – Thomas-Algorithmus — 292
  - B.4.2 ctrida — 292
  - B.4.3 dlyap\_exp – Lyapunov-Exponenten — 292
  - B.4.4 schmid – Orthogonalisierung — 293

- B.4.5      **FUNCTION volum – Volumen in  $n$  Dimensionen — 293**
- B.4.6      **FUNCTION deter – Determinante — 293**
- B.4.7      **random\_init – Zufallszahlen — 293**

**C      Lösungen der Aufgaben — 295**

- C.1      **Kapitel 1 — 295**
- C.2      **Kapitel 2 — 296**
- C.3      **Kapitel 3 — 297**
- C.4      **Kapitel 4 — 297**
- C.5      **Kapitel 5 — 303**
- C.6      **Kapitel 6 — 306**
- C.7      **Kapitel 7 — 308**

**D      README und Kurzanleitung FE-Programme — 313**

- D.1      **README — 313**
- D.2      **Kurzanleitung für Finite-Elemente-Programme (Kap. 6) — 316**
  - D.2.1      **gitter\_generator — 317**
  - D.2.2      **laplace\_solver — 317**
  - D.2.3      **gitter\_contur — 318**
  - D.2.4      **Was könnte besser werden? — 318**

**Stichwortverzeichnis — 319**