

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2016	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---------------------------	---

## Aufgabenblatt 3

### 3.1 Grundzustand von Lennard-Jones-Clustern (Hausaufgabe + Eintragen der Ergebnisse in das wiki in stud.ip bis Mitternacht vor der Übung am 3./4./6. 5. 2016)

Cluster aus Argonatomen können in guter Näherung klassisch modelliert werden. Ihre Hamiltonfunktion lautet

$$H(p, q) = \frac{0.1036446}{2m} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i^2 + 4\epsilon \sum_{i<j} \left( \frac{\sigma^{12}}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^{12}} - \frac{\sigma^6}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^6} \right). \quad (1)$$

Dabei sind  $m = 39.948$ ,  $\epsilon = 10.3$  und  $\sigma = 3.405$ . Die Einheiten sind so gewählt, dass Energien in meV, Längen in Å, Geschwindigkeiten in Å/ps und Massen in  $u$  angegeben sind.  $\vec{p}_i$  und  $\vec{x}_i$  bezeichnen den Impuls sowie den Ort des  $i$ -ten Argonatoms.

- Schauen Sie sich zur Wiederholung das Mathematica-Notebook zur Grundzustandssuche bei Argonclustern an.
- Erstellen Sie ein kleines „Periodensystem für Argoncluster“; berechnen Sie dazu die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Zahl der Argonatome für  $N = 5, \dots$ . Es könnte günstig sein, die Zahl der Schritte im Gradientenverfahren zu erhöhen und die Tricks, mit denen der Schwerpunkt in den Ursprung gezwungen wird usw. auszustellen.
- Tragen Sie Grundzustandsenergien und Koordinaten in das wiki in stud.ip ein. Bitte nach der Größe der Energien ordnen, wenn zu einer Teilchenzahl mehr als eine Energie gefunden wurde.
- Stellen Sie die Energien als Funktion der Teilchenzahl graphisch dar. Wie könnte die Grundzustandsenergie mit der Teilchenzahl skalieren? Kennen Sie ein Modell, in dem diese Fragen für ein etwas anderes System beantwortet werden? Diskutieren Sie!

## 3.2 Erste Schritte mit Linux-Servern (Hausaufgabe)

Zu den Einführungsvorlesungen in C hat Michael Czopnik dankenswerterweise ein paar Beispielprogramme geschrieben. Diese können Sie gern nutzen. Die folgenden Schritte sollen Ihnen erklären, wie Sie an das Archiv gelangen und wie Sie damit arbeiten können.

- a. Die Datei `Vorlesung_26_04_2016.tgz` ist ein Archiv. Sie kennen wahrscheinlich zip-Archive. Dieses ist ein Archiv, das mit `tar` und `gzip` erstellt wurde. Zum Entpacken brauchen Sie diese Programme.
- b. Das Archiv liegt auf dem Server des Computerphysik-Übungsraumes. Sie haben zwei Möglichkeiten, mit der Datei zu arbeiten: Sie können die Datei mit `sftp` auf Ihren lokalen PC/Laptop kopieren und dort weiterbearbeiten oder Sie können die Datei auf dem Server bearbeiten, indem Sie sich mittels `ssh` „einloggen“.

Zum Abholen der Datei führen Sie unter Linux/MacOSX/cygwin folgenden Befehl aus: `sftp sfpXX@srv-semd01.physik.uni-bielefeld.de`, dabei ist `sfpXX` Ihr Account. Danach müssen Sie das Passwort eingeben. Die Datei liegt in `/home/sfpshare`. Mit `cd /home/sfpshare` gelangen Sie in das Verzeichnis. Nun können Sie die Datei mittels `get Vorlesung_26_04_2016.tgz` auf Ihren Rechner kopieren. Mit `quit` beenden Sie die Verbindung.

- c. Wenn Sie gleich auf dem Server arbeiten wollen, müssen Sie sich mittels `ssh -Y sfpXX@srv-semd01.physik.uni-bielefeld.de` mit dem Server verbinden. Das Passwort wird abgefragt. Danach befinden Sie sich in Ihrem Heimatverzeichnis; das ist `cd /home/sfpXX`. Kopieren Sie jetzt die Datei in Ihr Heimatverzeichnis; das geht mit: `cp /home/sfpshare/Vorlesung_26_04_2016.tgz .` wobei der Punkt das Verzeichnis meint, in dem Sie gerade sind.
- d. Jetzt müssen Sie nur noch die Datei mittels `tar -zxvf Vorlesung_26_04_2016.tgz` entpacken. Wie ein Programm funktioniert, können Sie unter Linux/MacOSX/cygwin mit dem Befehl `man` ermitteln, z.B. `man tar`.
- e. Aus `ssh` verabschieden Sie sich mit `exit`.

Bitte reden Sie mit dem Tutor Ihres Vertrauens oder einem Kommilitonen bzw. einer Kommilitonin, wenn Sie glauben, das nicht zu schaffen. Wir wollen, dass Sie etwas lernen.

## 3.3 Einstieg in C (Hausaufgabe + Email, Einsendeschluss Miternacht vor der Übung am 3./4./6. 5. 2016)

- a. Schreiben Sie ein C-Programm, das Computerphysik ist toll ausgibt. **Einsenden!**
- b. Schauen Sie sich das Programm `Unbekannt.c` an, welches Sie in der Datei `Vorlesung_26_04_2016.tgz` finden. Versuchen Sie herauszufinden, was dieses Programm macht indem Sie die einzelnen Zeilen kommentieren und anschließend das Programm auch ausführen. **Einsenden!**

- c. Was ist und bedeutet call by value und welche Vorteile können sich daraus ergeben?  
**In der Übung erklären!**
- d. Was ist der Unterschied zwischen einem Funktionsargument und einem Funktionsparameter? **In der Übung erklären!**
- e. **Zusatzaufgabe:** Das Programm Fehler.c, welches ebenfalls in der Datei Vorlesung\_26\_04\_2016.tgz zu finden ist, behandelt das gleiche Problem wie Unbekannt.c. Dem Programmierer sind hierbei leider einige Fehler unterlaufen. ☹ Können Sie dem Programmierer helfen das Programm zum laufen zu bringen?  
**Einsenden!**

### 3.4 Approximation unendlicher Summen (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen am 3./4./6. 5. 2016)

- a. Schreiben Sie ein C-Programm, in dem Sie  $e$  durch

$$e \approx \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{1}{n!} \quad (2)$$

approximieren. Schreiben Sie dazu erst einmal ein Programm, in dem Sie die ersten Schritte einzeln ausführen und ausgeben, d.h. den nullten Schritt, ausgeben, dann den nächsten Summanden dazu addieren und ausgeben und so weiter.

- b. Schreiben Sie nun das Programm unter Verwendung einer Schleife. Geben Sie  $n_{\max}$  im Programm vor.
- c. **Zusatzaufgabe:** Ab welchem  $n_{\max}$  ändert sich Ihre Approximation nicht mehr? Warum das so ist, besprechen wir in der Vorlesung.
- d. **Zusatzaufgabe:** Schreiben Sie Ihr Programm so um, dass es  $n_{\max}$  als Parameter (also hinter dem Programmnamen) einliest.
- e. **Zusatzaufgabe für die ganz Harten:** Schreiben Sie jetzt noch ein shell script, das eine äußere Schleife 1, 2, 3, 4, ... für  $n_{\max}$  realisiert und Ihr Programm dann mit diesem Parameter aufruft.