

<p style="text-align: center;">5. Übungssektion: – Computerorientierte Theoretische Physik Zeitsolver, Fouriertransformation oder Harmonicinversion</p>
--

Erster Übungstermin dieser Sektion: ab 10.01.2019. Die Nachbereitungsaufgaben sind in der Übung, die diese Sektion abschließt, abzugeben/zu besprechen.

Vorbereitungsaufgabe 1 : *Studium der notwendigen Numerikpakete/-methoden*

1. Für diese Übungssektion steht es Ihnen frei, ob Sie sich ein Problem für die Anwendung eines Runge-Kutta Algorithmus, Fourier-Transformationen (DFT oder FFT) und/oder harmonic inversion verwenden (oder gerne auch eine Kombination der Methoden). Zur Vorbereitung schauen Sie sich geeignete Algorithmen/Bibliotheken an. (Es ist immer möglich von der Vorschlägen hier sinnvoll abzuweichen, ggf. nach Rücksprache).
2. **Runge-Kutta:** Wenn Sie einen RK-Algorithmus nicht selbst programmieren wollen, beschäftigen Sie sich bitte mit TS Interface von Petsc, z.B. *src/ts/examples/tutorials/ex5.c* oder ein anderes Beispiel, falls Sie ein nichtlineares Problem implementieren wollen.
3. **DFT:** Überlegen Sie sich wie Sie den Algorithmus implementieren wollen.
4. **FFT:** In dem Fall erfolgt die Implementierung am besten über die Bibliothek FFTW (Petsc hat auch ein Interface), machen Sie sich bitte damit vertraut.
5. Harmonic inversion: Machen Sie sich bitte mit der Bibliothek harminv vertraut.
6. Suchen Sie sich geeignete Formeln, die sich für das Problem, das Sie implementieren wollen, heraus.

Aufgabe 2 : *Lösung eines physikalisch motivierten Problems*

1. Suchen Sie sich für die Methode (Runge-Kutta, DFT, FFT und/oder harminv) ein geeignetes physikalisches Problem. Beispiele: **Runge-Kutta:** gekoppelte schwimmende klassische Teilchen, gekoppelten Harmonische Oszilatoren (klassisch oder quantenmechanisch), Halbleiter-Blochgleichungen, **DFT, FFT, harminv:** Berechnung von Spektren oder Korrelationsfunktionen (wie Spektralfunktionen) von exzitonischen Systemen, gekoppelten harmonischen Oszilatoren, Multilevelsystemen, independent Bosonmodel etc. .
2. Im Fall von DFT, FFT, harminv gehört auch die (numerische) Lösung des physikalischen Modells zur Aufgabenstellung.