Einführung in numerische Methoden

Andreas Nogga, Forschungszentrum Jülich

Schülerakademie Teilchenphysik 2015, Jülich

Beispiel: Newtonsche Bewegungsgleichungen

- Problem eines schwingenden Reagenzglases
- Differentialgleichung als Ausgangspunkt
- Diskretisierung der Bewegungsgleichungen
- Anfangswerte
- Lösungsschema

Warum numerische Methoden?

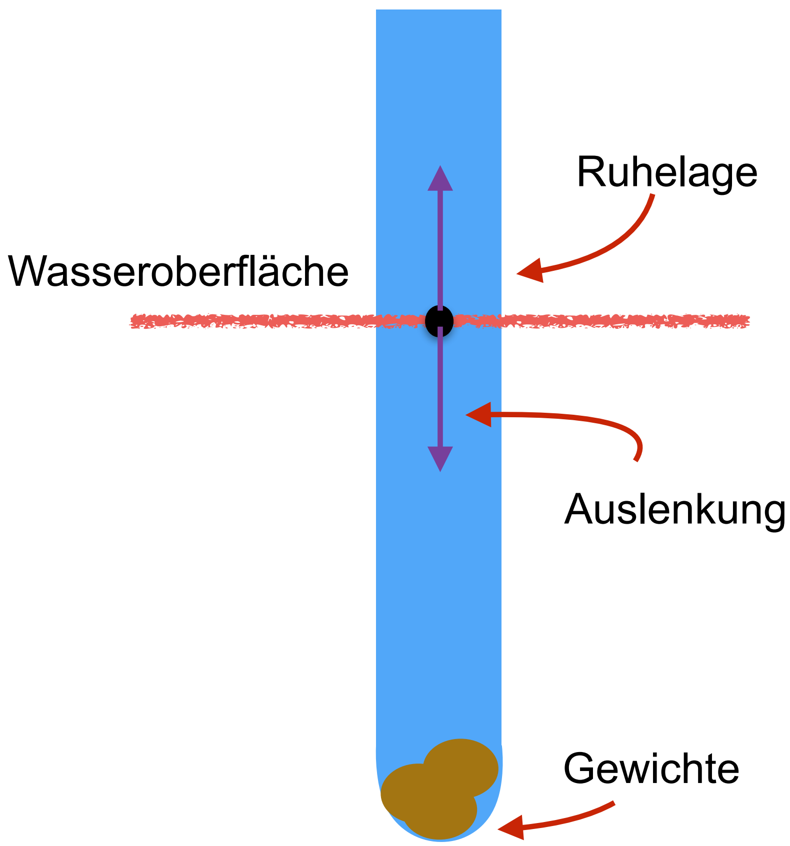
- grundlegenden Gleichungen für viele physikalische und technische Problem sind bekannt (oder es existiert eine Idee)

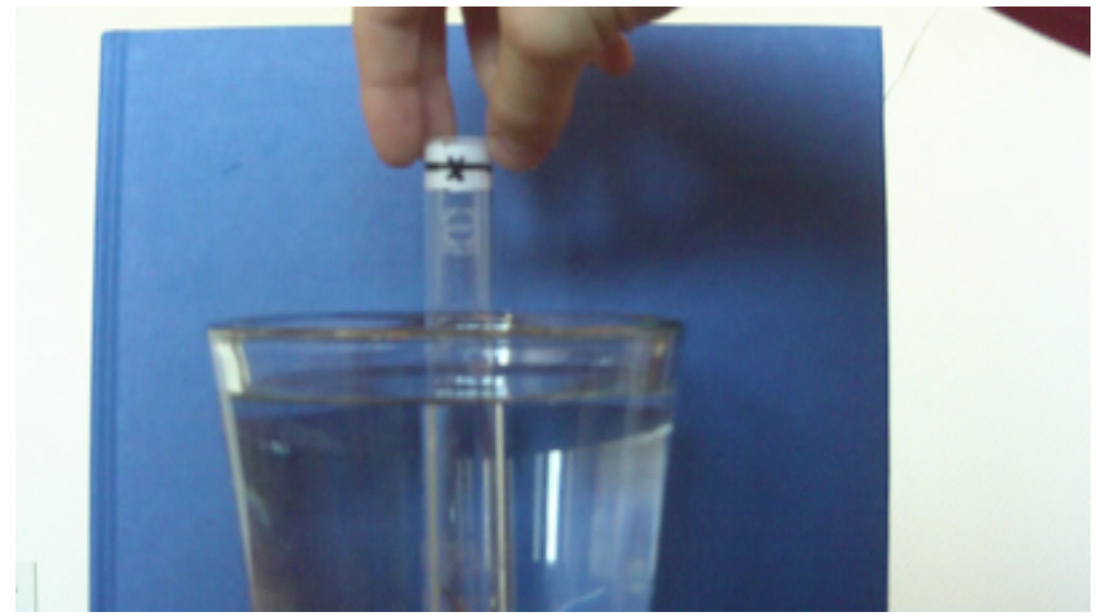
- aber analytische Lösungen sind oft nicht möglich (insbesondere für die starke Wechselwirkung)

→ dann können Computer helfen eine Lösung zu finden ("Simulation")

- *zur Überprüfung der Ausgangsgleichungen*
- *um Lösungen zu nutzen für weitere Forschung*

Beispiel: Reagenzglas im Wasser





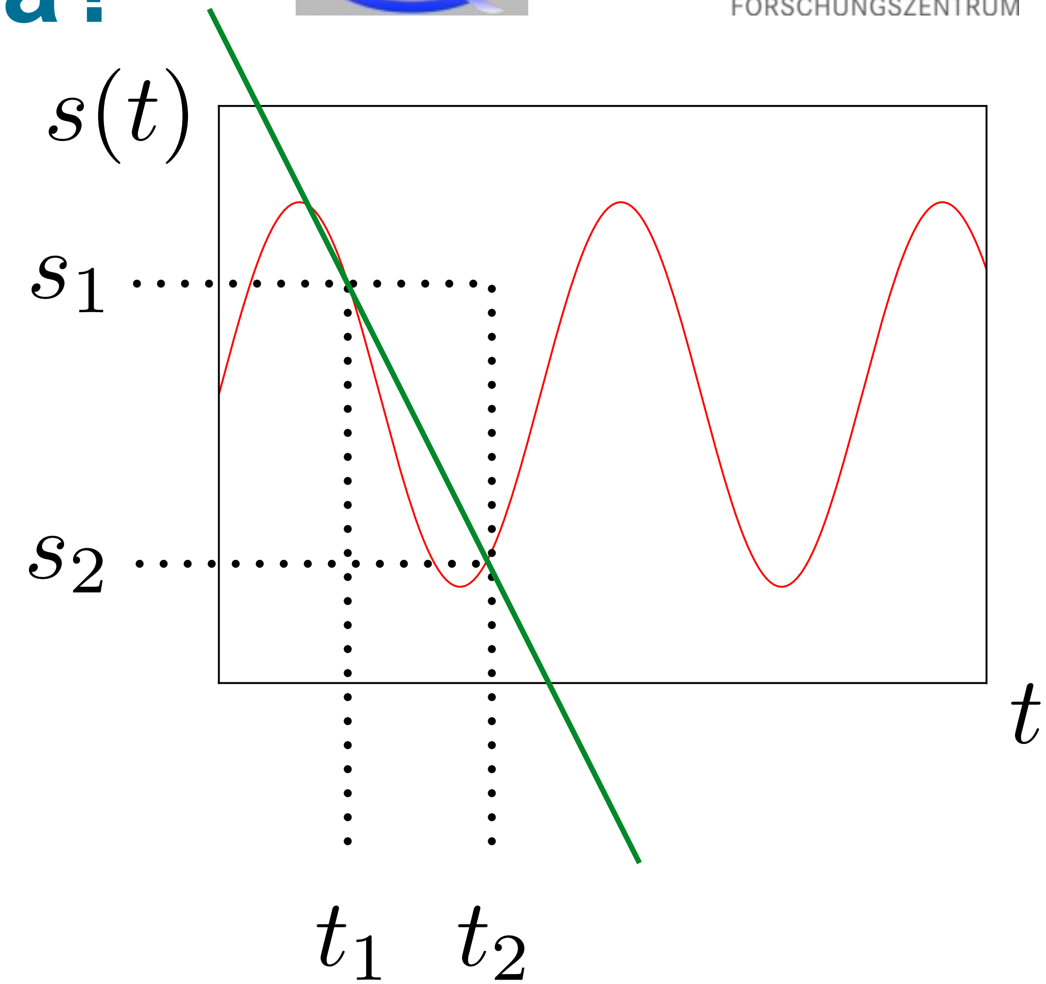
Das Problem sollte durch die Newtonschen Bewegungsgleichungen beschrieben werden

$$F = m \cdot a$$

wir sind nur an der vertikalen Bewegung interessiert $\longrightarrow$ eindimensionales Problem

Was ist die Beschleunigung a?

Ort: $s = s(t)$ zeitabhängig



Geschwindigkeit: Änderung des Ortes

Durchschnittsgeschwindigkeit

$$\bar{v} = \frac{s_1 - s_2}{t_1 - t_2}$$

Wie erhält man die Momentangeschwindigkeit?

Wähle Zeiten der nahe beieinander (“Ableitung”):

$$v = v(t) = \frac{s(t+h) - s(t-h)}{2h}$$

Mathe: finde den “Grenzwert” für $h \longrightarrow 0$

Numerik: wähle ein endliches $h \neq 0$ (“Diskretisierung”)

Beschleunigung: Änderung der Geschwindigkeit

Warum?

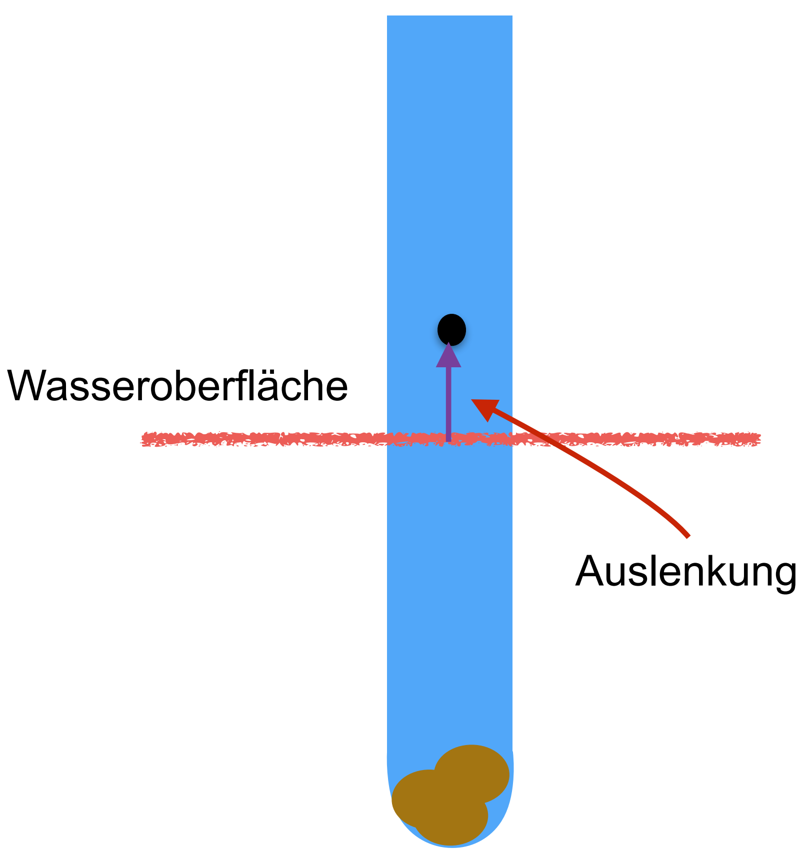
$$a = a(t) = \frac{v(t+h) - v(t-h)}{2h} = \frac{s(t+2h) - s(t) - s(t) + s(t-2h)}{(2h)^2} = \frac{s(t+h) - s(t) - s(t) + s(t-h)}{h^2}$$

Newtonsche Bewegungsgleichung

$$F = m \cdot a = m \cdot \ddot{s}(t) = F[s(t)]$$

- Die Beschleunigung ist die zweite Ableitung des Ortes
- Die Kraft hängt vom Ort (und evt. der Geschwindigkeit) ab
- Newtonsche Bewegungsgleichung ist damit eine **“Differentialgleichung”**

Wir brauchen eine Kraft!



Archimedisches Prinzip: $F = -s \cdot A\rho g$

Masse des Wasser x Fallbeschleunigung

Differentialgleichung / **Anfangswertproblem**

$$\Longrightarrow \quad \ddot{s}(t) = -s \cdot \frac{A\rho g}{m}$$

Numerische Lösung

1. ersetze Ableitung durch Ausdruck mit endlichem $h \neq 0$
2. wähle Anfangsbedingungen: loslassen des Reagenzglases bei s_0 mit v_0

Nutze diskretisierte Differentialgleichung um Lösung schrittweise aufzubauen:

0.Schritt: $s(0) = s_0 \quad s(h) = s_0$

1.Schritt: Was ist $s(2h)$?

Differentialgleichung in diskreter Form

$$\ddot{s}(h) \approx= \frac{s(2h) - 2s(h) + s(0)}{h^2} = -s(h) \cdot \frac{A\rho g}{m}$$

$$s(2h) = +2s(h) - s(0) - s(h) \cdot \frac{A\rho g}{m} \cdot h^2$$

zwei Startwerte sind notwendig für den 1. Schritt!

→ "Differentialgleichung 2. Ordnung haben zwei unabhängige Lösungen"

Numerische Lösung

2.Schritt: Was ist $s(3h)$?

$$s(3h) = +2s(2h) - s(h) - s(2h) \cdot \frac{A\rho g}{m} \cdot h^2$$

jetzt schon bekannt ✔

n.Schritt: Was ist $s((n+1)h)$?

$$s((n+1)h) = +2s(nh) - s((n-1)h) - s(nh) \cdot \frac{A\rho g}{m} \cdot h^2$$

jetzt schon bekannt ✔

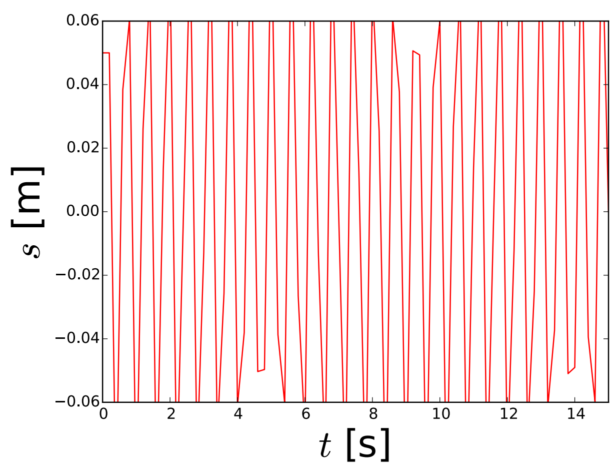
Damit kann man die ganze Lösung finden, wenn man nur schnell genug die vielen Schritte ausführen kann

⟹ **Computer**

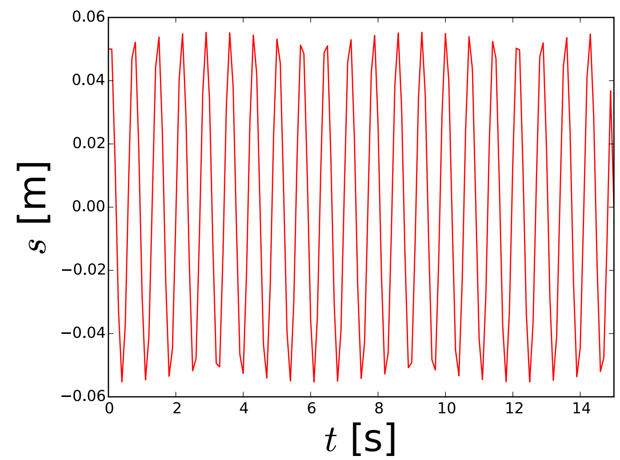
Teste Schrittweite

$s_0 = 0.05\,\mathrm{m} \qquad \rho = 1000\,\mathrm{kg/m^3} \qquad A = \pi(0.0098)^2\,\mathrm{m}^2 \qquad m = 0.04054\,\mathrm{kg} \qquad g = 9.81\,\mathrm{m/s^2}$

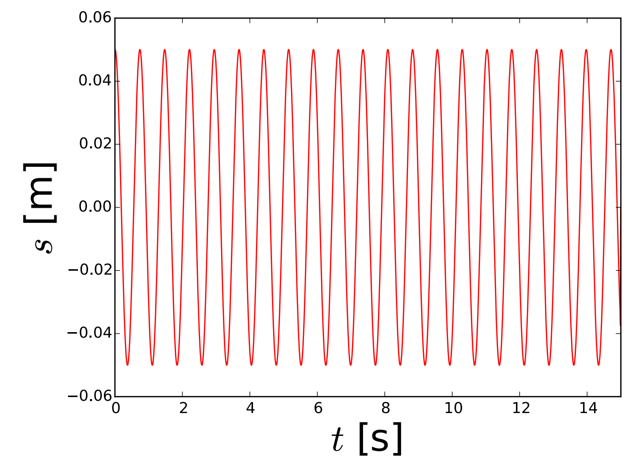
h=0.2 s



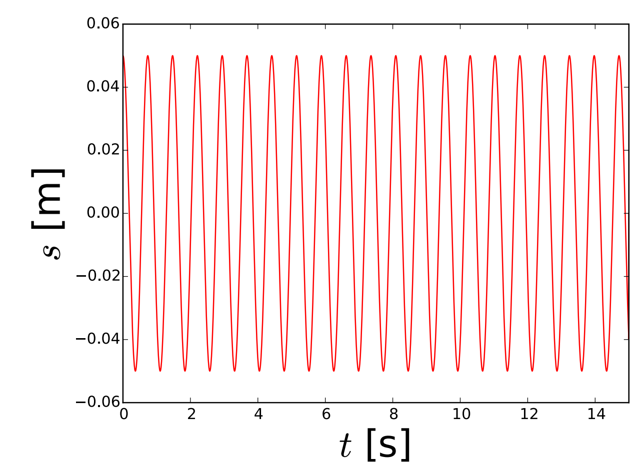
h=0.1 s



h=0.01 s

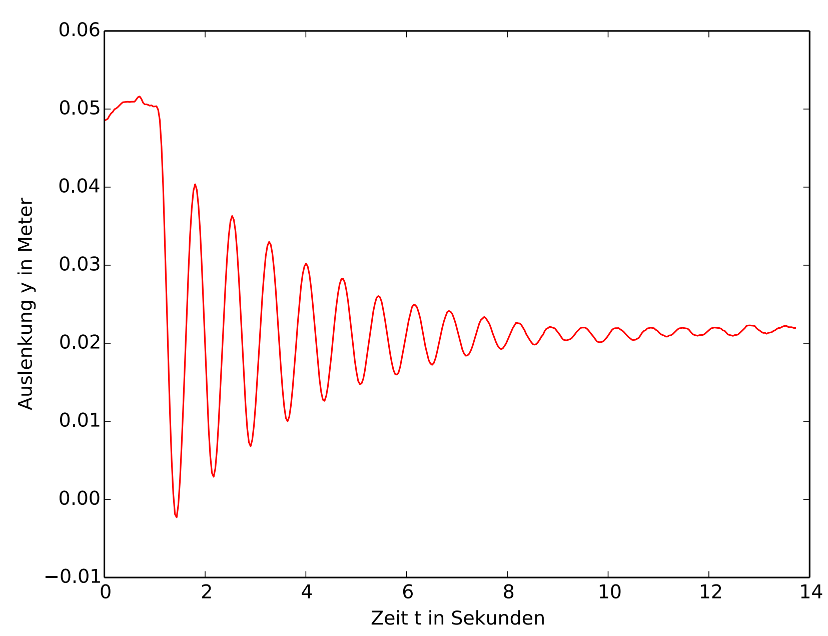


h=0.001 s



h=0.01 s scheint genau zu sein!

Experiment?



Das sieht anders aus!

Was fehlt uns?

Python Skript (Ausschnitt)

python

```
h=0.2  #  s
m=0.04054 # kg
rho = 1000 # kg / m^3
A=np.pi*(0.0098)**2  # m^2
g=9.81  #  m/s

nstep=int(15.0/h)
maxt=h*nstep
tgrid=np.linspace(0,maxt,nstep+1)
sgrid=np.zeros(nstep+1)

sgrid[0]=0.05 # m
sgrid[1]=0.05 # m
for i in range(2,nstep):
  sgrid[i]=2*sgrid[i-1]-sgrid[i-2]-sgrid[i-1]*h**2*A*rho*g/m
```

Reibung

Reibung hängt von Geschwindigkeit ab!

einfachste Annahme zuerst: Reibung proportional zu v!

$$F_{reib} = -v(t) \cdot C \approx -\frac{s(t+h) - s(t-h)}{2h} \cdot C$$

Differentialgleichung erhält dann einen zusätzlichen Term

$$\ddot{s}(t) = -s \cdot \frac{A\rho g}{m} - v(t) \cdot \frac{C}{m}$$

Diskretisiert ergibt sich damit im n. Schritt

$$s((n+1)h) = +2s(nh) - s((n-1)h) - s(nh) \cdot \frac{A\rho g}{m} \cdot h^2 - \frac{s((n+1)h) - s((n-1)h)}{2h} \cdot \frac{C}{m} \cdot h^2$$

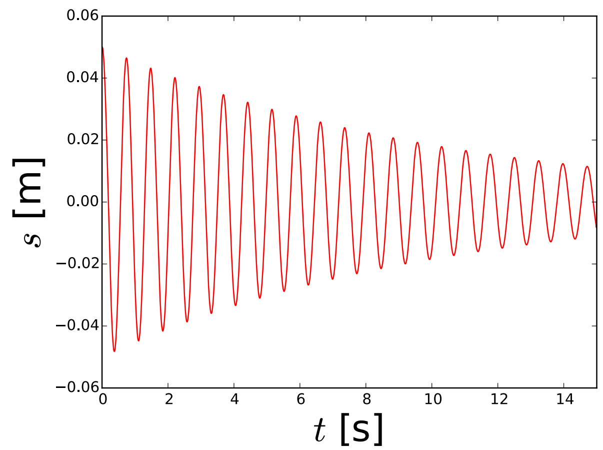
$$\Longrightarrow \quad s((n+1)h) = \left(1 + \frac{C}{2m} \cdot h\right)^{-1} \cdot \left(+2s(nh) - s((n-1)h) - s(nh) \cdot \frac{A\rho g}{m} \cdot h^2 + s((n-1)h) \cdot \frac{C}{2m} \cdot h\right)$$

Das ist für den Computer kein nennenswerter Unterschied, aber das Resultat …

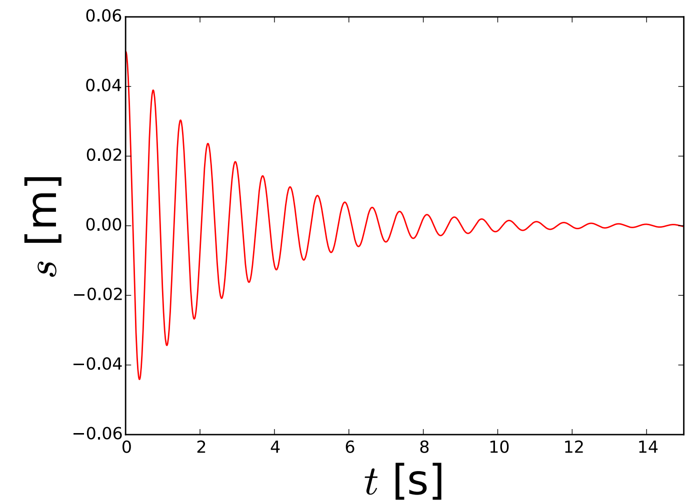
Simulation mit Reibungsterm

$s_0 = 0.05\,\mathrm{m} \qquad \rho = 1000\,\mathrm{kg/m^3} \qquad A = \pi(0.0098)^2\,\mathrm{m}^2 \qquad m = 0.04054\,\mathrm{kg} \qquad g = 9.81\,\mathrm{m/s^2} \qquad h = 0.01\ \mathrm{s}$

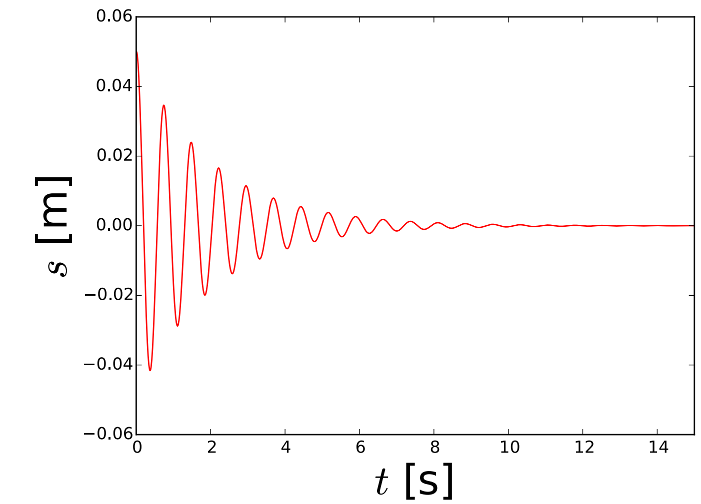
C = 0.008108 kg/s



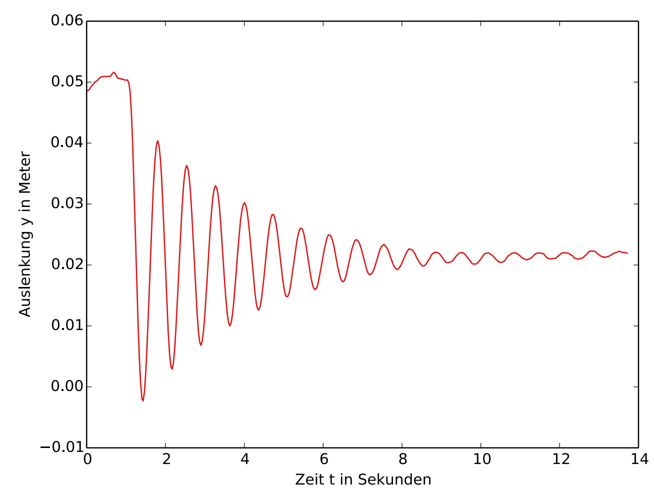
C = 0.0275672 kg/s



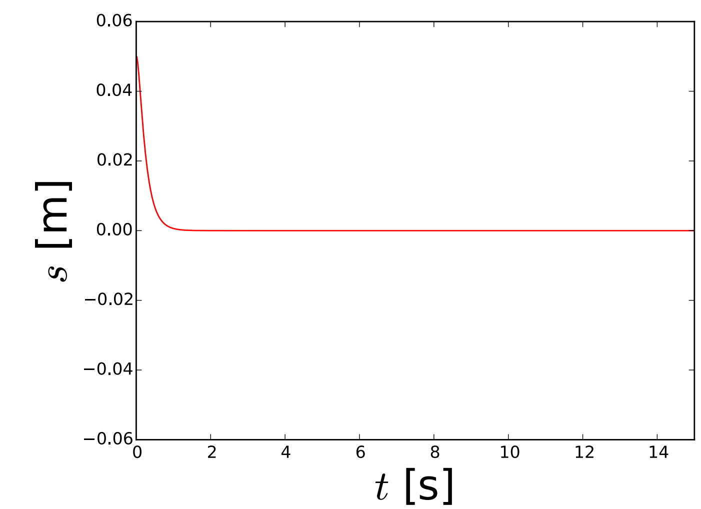
C = 0.04054 kg/s



Experiment



C = 0.8108 kg/s



Python Skript (Ausschnitt)

python

```
h=0.01  #  s
m=0.04054 # kg
rho = 1000 # kg / m^3
A=np.pi*(0.0098)**2  # m^2
g=9.81  #  m/s
C=0.34*2*m  #  kg/s

print "C = ",C,"kg/s"

nstep=int(15.0/h)
maxt=h*nstep

tgrid=np.linspace(0,maxt,nstep+1)
tgrid=tgrid+1.09
sgrid=np.zeros(nstep+1)

sgrid[0]=0.05 # m
sgrid[1]=0.05 # m

for i in range(2,nstep):
   sgrid[i]=(1+C*h/(2*m))**(-1)*(2*sgrid[i-1]-(1-C*h/(2*m))*sgrid[i-2]-sgrid[i-1]*h**2*A*rho*g/m)
```

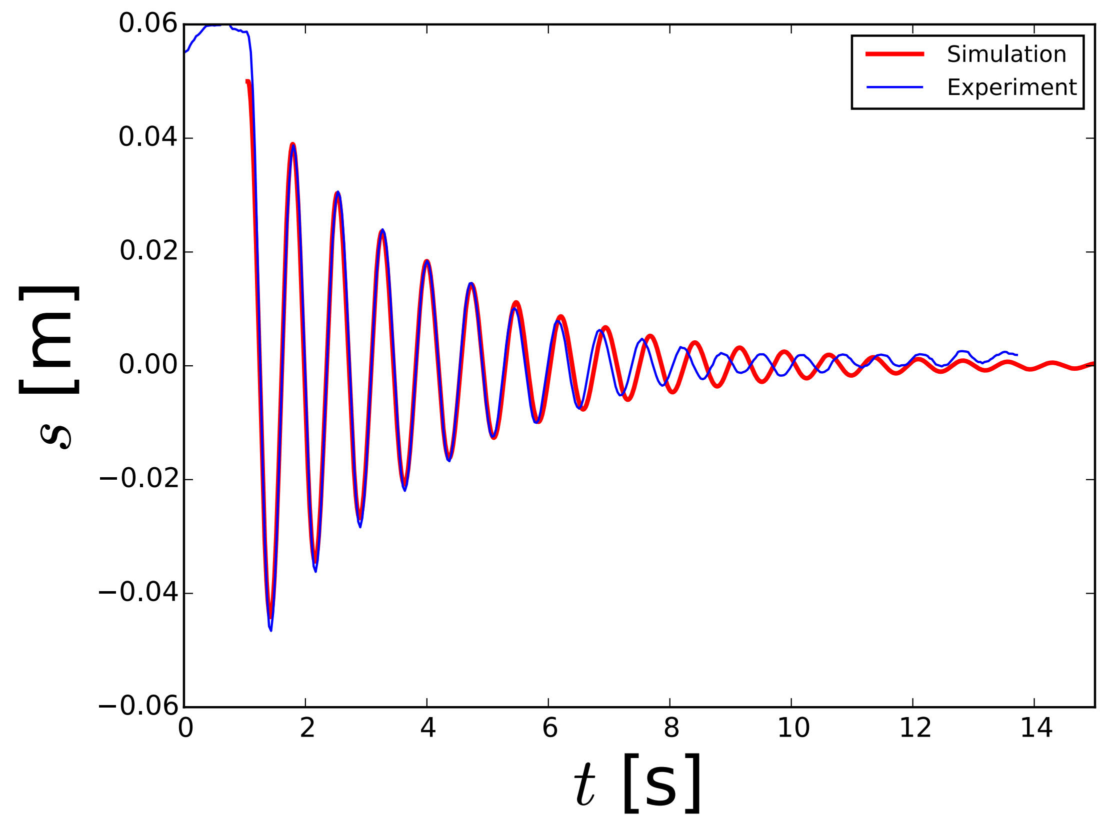
Direkter Vergleich

$s_0 = 0.05\,\mathrm{m}$ $\rho = 1000\,\mathrm{kg/m^3}$ $A = \pi(0.0098)^2\,\mathrm{m^2}$ $m = 0.04054\,\mathrm{kg}$ $g = 9.81\,\mathrm{m/s^2}$ $h = 0.01\ \mathrm{s}$

```
C = 0.0275672 kg/s
```

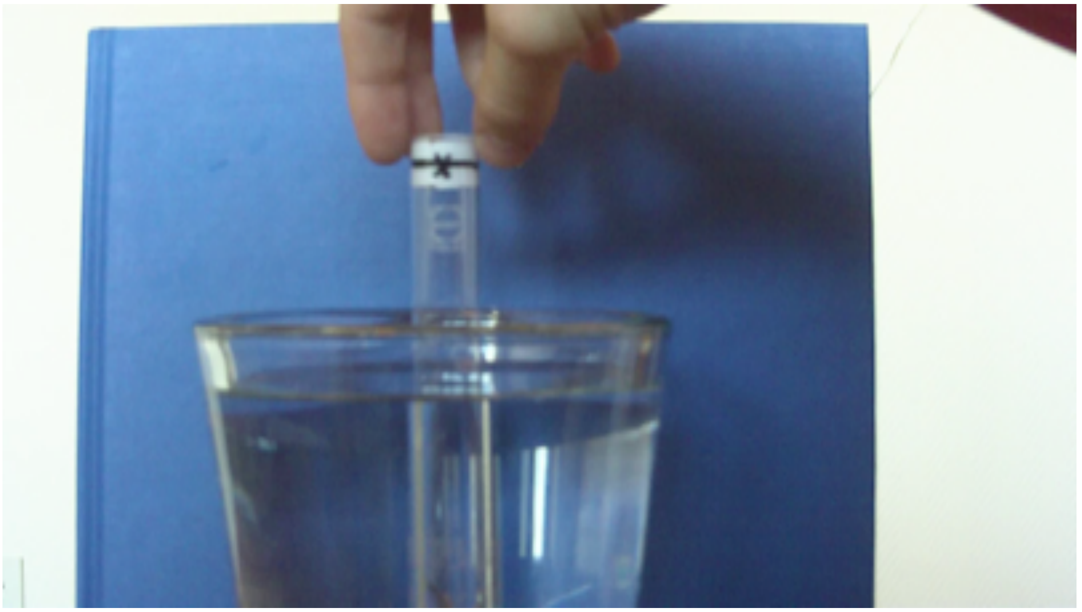
Koordinatensystem angepasst:

- Anfangszeit verschoben
- Nullpunkt = Ruhelage



Sieht gut aus!

Woher kommen Abweichungen bei größeren Zeiten?



Zusammenfassung

- Beispiel: Lösung eines Anfangwertproblems
  - *es gibt andere numerische Probleme*
  - *Ideen hier tauchen häufig auch*
  - *generell: Kontinuum → diskretes Problem ("Diskretisierung")*
- Differentialgleichung
  - *keine eindeutige Lösung*
  - *Startwerte unterscheiden mögliche Lösungen*
    (hier zwei, weil Differentialgleichung zweiter Ordnung)
- kompliziertere Wechselwirkung sind in der Regel einfache Erweiterung des Programms