Computergestütztes wissenschaftliches Rechnen (CWR), Sommer 2021

Dozent: F. Heidrich-Meisner (ITP)

Übungen: Dr. Enrico Bothmann (ITP)

Organisatorisches

Start Recording

Bis auf weiteres:

VL, UE: online, synchron

VL: zoom, siehe StudIP

Online Sprechstunde: dienstags, 15h, zoom

Hybrid-Betrieb (falls das kommt)

VL in Hybrid: Präsenz + zoom in Rotation (durch Studiendekanat vorgegeben)

Beginn Übungen: 2. Semesterwoche

Einteilung Übungsgruppen:

1. Semesterwoche via StudIP: max. 10%

Format Übungen

- 4SWS, online
- Wöchentliches Übungsblatt
- 4 Hausaufgaben mit Abgabe als Prüfungsvorleistung!
  (14 Tage Bearbeitung)
  Programm muss laufen und die Ergebnisse nachvollziehbar produzieren, korrekte Beantwortung Fragen
- Abgabe über git Repository!
  (gitlab.gwdg.de)
  → Versioning
- $\boxed{\text{Sprache: C}}$
- Visualisierung: Python

Prüfung:

- Programmierprojekt, benotet
  Kriterien: funktionierendes Programm,
  Diskussion + Auswertung Daten
  Aufbereitung der Daten in Abb.
  Dokumentation + Lesbarkeit Programm
- Individuelle Abgabe von Code
  + Bericht
- 14 Tage Bearbeitung
- Zwei Bearbeitungszeiträume:
  - 16. - 27. 8. 2021
  - 20. 9. - 1. 10. 2021
- Sprache: C
  Gruppenarbeit: max 3. Personenen
  auf Anmeldung, gemeinsamer Code,
  individueller Report

Literatur und Materialien

- Aufzeichnung, kommt ins StudIP (mündliche Fragen werden aufgezeichnet)
- Kopie der Mitschrift / Vorlage des Dozenten -> StudIP
- Literatur:

a) Tao Pang: Introduction to Computational Physics (Cambridge)

b) J. M. Thijssen: Computational Physics (Cambridge)

1) Ziele und Aufbau der VL

Wozu Computational Physics?

- Allg. analytische Lösung der Grundgleichungen der Physik existiert nicht.

Mechanik:

- Gew. DGL 2. Ordnung:

$\vec{F} = m\ddot{\vec{r}}$ Newton II

$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$ Lagrange II

Anfangswertprobleme

q_i: verallgemeinerte Koordinaten

$\dot{q}_i$: — " — Geschwindigkeit

p_i: — " — Impulse

- Partielle DGL 1. Ordnung

Hamiltongleichungen

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \qquad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i$$

Beispiele:

- Dreikörperproblem
- Planetenbewegung -> Mondlandung
- Nichtlineare Systeme:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0 x^2 + V_0 x^4$$

- Chaos
- Kontinuums/ Strömungsmechanik

$\operatorname{div} \vec{E} \propto \vec{\rho}$

$\operatorname{rot} \vec{E} \propto \partial_t \vec{B}$

Elektrodynamik

- Partielle DGLen, Randwertproblemen

Beispiel: Elektrostatik, Φ: Potential

$\rho(\vec{r})$: Ladungsdichte

$$\Delta \Phi(\vec{r}) = \frac{-1}{\varepsilon} \rho(\vec{r}) \quad \text{(Poissongleichung)}$$

$$\Rightarrow \quad \Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon} \int d\vec{r}\,' \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}$$

QM

- zeitunabh. Schrödinger gleichung:

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ $\qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0$

→ Eigenwertproblem $\qquad \psi(0), \psi(L) = ?$

Wellenmechanik:

→ gewöhnliche DGL, Randwertproblem
2. Ordnung $\qquad$ + LINEARE ALGEBRA

- zeitabh. Schrödinger glg.

$i\hbar\,\partial_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ $\qquad \psi(t=0) = \psi_0$

→ Anfangswertproblem

Vielteilchensysteme / Statistische Physik

- Phasendiagramm, -übergänge

Auswertung von (großen) Datenmengen

- Visualisierung Reproduzierbar!
- Statistische / Fehleranalyse
- Machine Learning
- Data Science

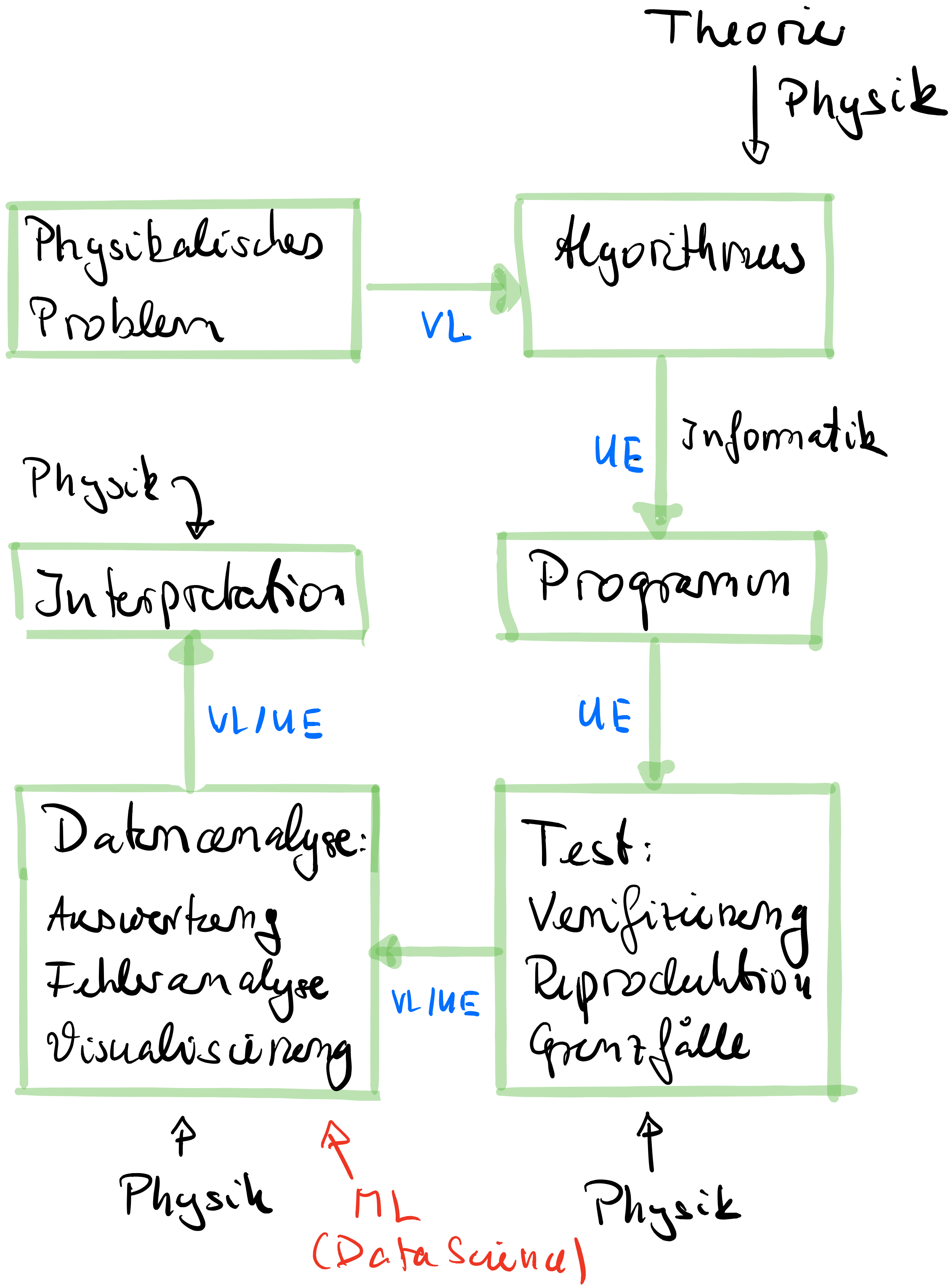
Anwendungen von Comp. Phys in der aktuellen Forschung

- Hochenergiephysik (Streuprozesse)
- Astrophysik
- Kosmologie (Galaxienbildung, Strukturbildung)
- Statistische Physik
- Geophysik (Magnetfelder, Plasmaphysik)

- Festkörperphysik: Materialeigenschaften
- Quantenvielteilchensysteme
- Biophysik
- ...

→ Fast keine Physikerin kommt ohne Computational Physics aus!

Ziel der VL / Comp. Physik



Aufbau der VL

1) Numerische Integration und Differentiation: Analysis mit dem Computer (1 VL)

2) Grundlagen numerischer Arbeit (1 VL)

3) Gewöhnliche DGLen Anfangswertprobleme (2 VL)

4) Anwendungen aus der klassischen Mechanik (1 VL)

5) Partielle DGl en (2 VL)

6) Anwendungen aus der Elektrodynamik (1 VL)

7) Lineare Algebra (1 VL)

8) Anwendungen aus der QM (1 VL)

9) Monte-Carlo Methoden (3 VL)

Σ 13 VL

Wichtig: Kein Lernerfolg ohne eigenes Programmieren!

Pause: 9:25 Restart Recording

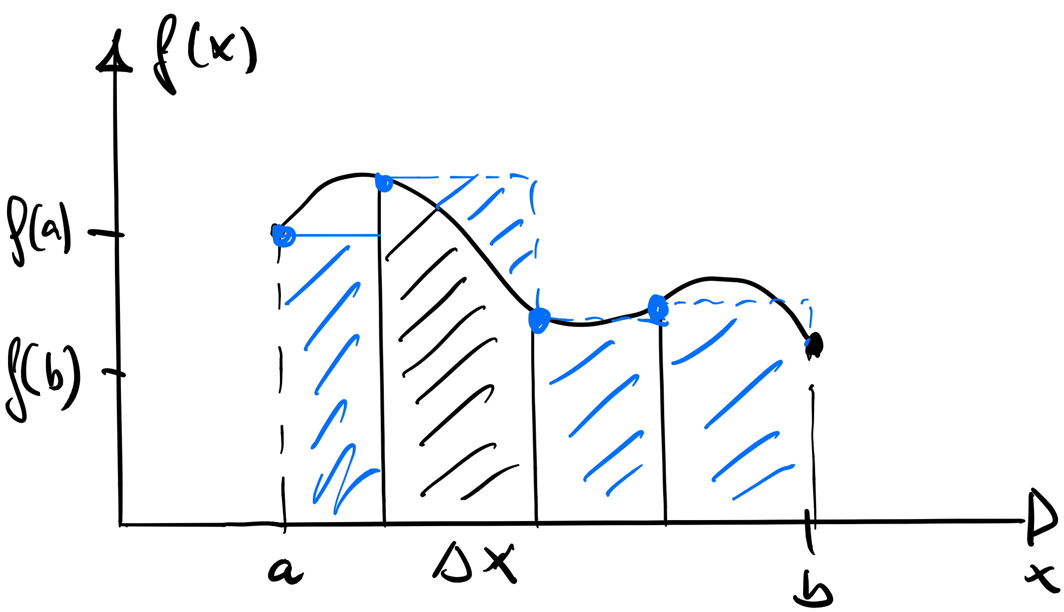
1) Numerische Integration und Differentriation

1.1) Integration

$$\boxed{I = \int_a^b dx\, f(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \sum_i f(x_i) \cdot \Delta x}$$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} R_f(\Delta x)$$

: Riemannsumme



Diskretisierung Intervall $[a,b]$:

$x_i = a + i\Delta x$; $\frac{b-a}{\Delta x} = N$: Anzahl Intervalle

$i = 0, \ldots, N$: Stützstellen

$$\boxed{R_f(\Delta x) = \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i)\cdot\Delta x \quad \hookrightarrow \text{blaue Punkte}}$$

oder

$$\tilde{R}_f(\Delta x) = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\cdot\Delta x$$

oder

$$\tilde{\tilde{R}}_f(\Delta x) = \sum_{i=1}^{N} f(m_i)\,\Delta x = \Delta x\sum_{i=1}^{N} f(m_i) =: M_f(\Delta x)$$

$m_i = \frac{x_{i+1}+x_i}{2}$: Mittelpunkt

$M_i = f(m_i)\cdot\Delta x$

Wichtig:

- Konvergenz von R_f gegen I mathematisch gesichert
- Kontrollparameter: Δx

$\Delta x \to 0$ minimiert Fehler $I - R_f(\Delta x)$

mit

$\exists\, \Delta x(\varepsilon): \; |I - R_f(\Delta x)| < \varepsilon \quad$ für alle $\varepsilon > 0$.

Offen:

- Wie gut ist die Konvergenz?
- Fehlerabschätzung?

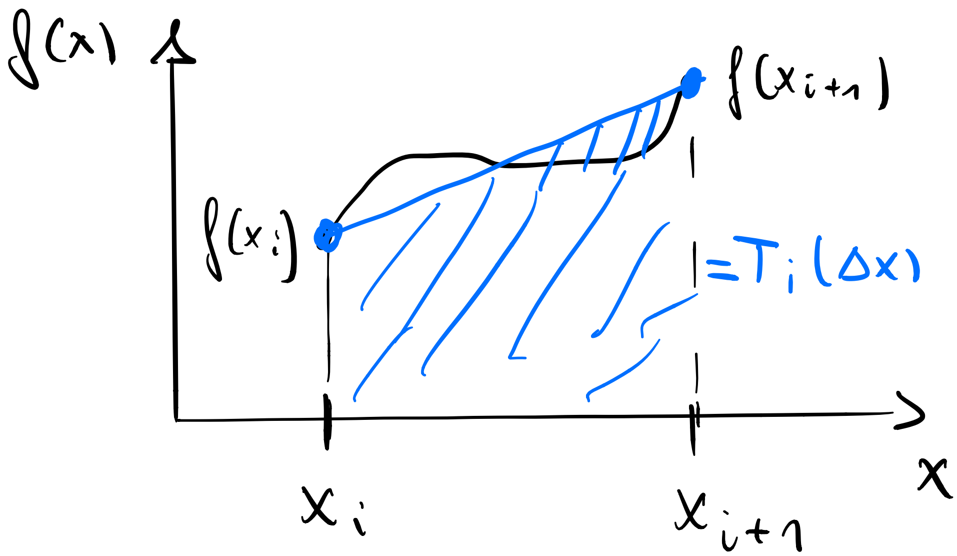
$$I = R_f(\Delta x) + O(\Delta x^n)$$

2

Qualitativ: mit welcher Potenz Δx^n geht $I - R_f$?

Alternative Verfahren:

Trapezregel



$$\Rightarrow \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx\, f(x)$$

$$\approx \frac{\left(f(x_{i+1}) - f(x_i)\right)}{2} \Delta x + f(x_i)\,\Delta x$$

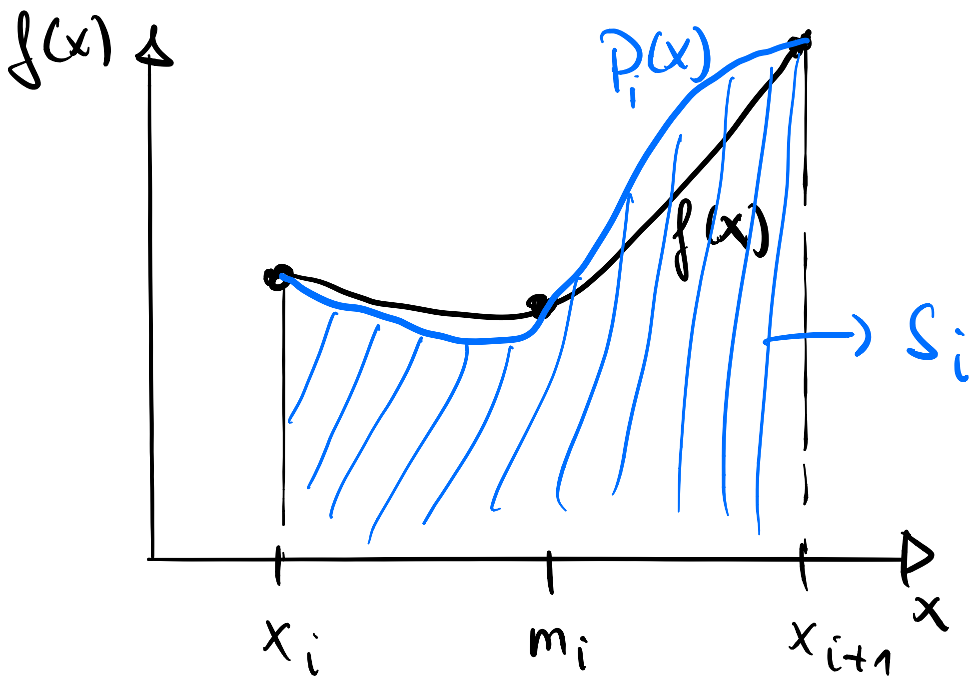
$$= \boxed{\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2}\,\Delta x} =: T_i(\Delta x)$$

$$\boxed{\Rightarrow \int_a^b dx\, f(x) \approx \frac{\Delta x}{2}\Big(f(x_0) + 2f(x_1) + \ldots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)\Big) =: T_f(\Delta x)}$$

→ nur einmal mit Δx multiplizieren
(# Rechenoperationen minimieren)

UE: Welches Vz. hat der Fehler $I - T_f$ für ein konkave Funktion?

Simpsonregel



$\leadsto$ Ein Polynom p_i pro Intervall $[x_i; x_{i+1}]$

$p_i(x)$: Polynom 2. Grades mit

$$\boxed{\begin{aligned} p_i(x_i) &= f(x_i) \\ p_i(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \\ p_i\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) &= f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \end{aligned}}$$

$$m_i = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} = x_i + \frac{x_{i+1} - x_i}{2}$$

$$p_i(x) = a_i + b_i x + c_i x^2$$

$$\Rightarrow \boxed{S_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx \; p_i(x)}$$

→ analytisch ausführen (allgemeines f)

<u>Koeffizienten a_i, b_i, c_i:</u>

$$p_i(x) = f(x_i) \frac{(x - x_{i+1})(x - m_i)}{(x_i - x_{i+1})(x_i - m_i)}$$

$$+ f(m_i) \frac{(x - x_{i+1})(x - x_i)}{(m_i - x_{i+1})(m_i - x_i)}$$

$$+ f(x_{i+1}) \frac{(x - x_i)(x - m_i)}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - m_i)}$$

verwendet 3. Stützstellen!

$$\Rightarrow \boxed{S_i = \frac{\Delta x}{6} \left[f(x_i) + 4 f(m_i) + f(x_{i+1}) \right]}$$

UE:

a) S_i nachrechnen

b) Falls (Notation $S_f \to S$ etc.

$$T_i = \frac{1}{2} \Delta x \left(f(x_i) + f(x_{i+1}) \right)$$

$$M_i = \Delta x \; f(m_i) \quad \text{(Mittelpunkt)}$$

$$\Rightarrow \boxed{S_i = \frac{2M_i + T_i}{3}}$$

Test der korrekten Implementierung!

c) Fehler (Hausaufgabe): Abhängigkeit von Δx

$$I - S \propto (\Delta x)^4$$

$$I - T \propto (\Delta x)^2$$

$$I - M \propto (\Delta x)^2$$

Bemerkungen:

- Es gibt Fehlerabschätzungen

z.B.

$$S_{a,b} \leq const \; \frac{(b-a)^5}{180 N^4};$$

$$const = \max_{x \in [a,b]} \left| f^{(4)}(x) \right|$$

$\Rightarrow$ so kann N gewählt werden.

- Variationen: angepasste Intervallbreite

Δx_i

1.2) Differentiation

Ziel: Ersetze $f'(x)$ durch geeignete Differenzen

Ausgangspunkt: Taylorreihe um $x = x_0$:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{6!} f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \ldots$$

$$= T_{x_0}(x)$$

Betr. $T_{x_0}(x)$ rechts und links von x_0:

$x = x_0 \pm \delta$

$$f(x_0 + \delta) = f(x_0) + f'(x_0)\,\delta + \frac{1}{2!} f''(x_0)\,\delta^2 + \frac{1}{6!} f'''(x_0)\,\delta^3 + \ldots$$

$$f(x_0 - \delta) = f(x_0) - f'(x_0)\,\delta + \frac{1}{2!} f''(x_0)\,\delta^2 - \frac{1}{6!} f'''(x_0)\,\delta^3 + \ldots$$

→ alternierendes VZ in $f(x_0 - \delta)$

Vorwärts- / Rückwärtsdifferenz:

$$f(x_0 \pm \delta) - f(x_0) = \pm f'(x_0)\cdot\delta + \boxed{\mathcal{O}(\delta^2)}$$

$$\Rightarrow f'(x_0) \simeq \begin{cases} \dfrac{f(x_0+\delta) - f(x_0)}{\delta} \\[2ex] \dfrac{f(x_0) - f(x_0-\delta)}{\delta} \end{cases} + \underline{\mathcal{O}(\delta)} \quad (*)$$

Korrekturen $\sim \mathcal{O}(\delta^2)$

Bessere Ausdrücke?

Betrachte

$$f(x_0+\delta) - f(x_0-\delta) = 2f'(x_0)\delta + \frac{2}{6!} f'''(x_0)\,\delta^3 + \ldots$$

$$\Rightarrow \boxed{f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0+\delta) - f(x_0-\delta)}{2\delta} + \mathcal{O}(\delta^2)}$$

$\rightarrow$ Besser als Glg $(*)$

Wichtig in der Physik: 2. Ableitung

(Newton II, Schrödinger, Wellengleichung)

Betrachte:

$$f(x_0+\delta) + f(x_0-\delta) = 2f(x_0) + f''(x_0)\,\delta^2 + \frac{2}{4!} f^{(IV)}(x_0)\,\delta^4 + \ldots$$

$$\Rightarrow \boxed{f''(x_0) \simeq \frac{f(x_0+\delta) + f(x_0-\delta) - 2f(x_0)}{\delta^2} + \mathcal{O}(\delta^2)}$$

1.3) Nullstellensuche

z.B.:

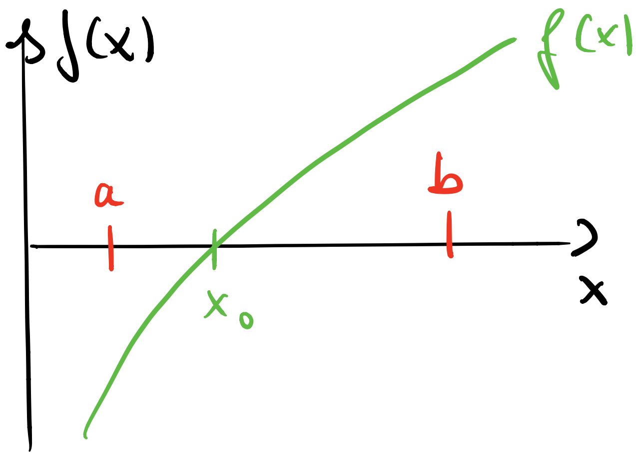
- Eigenwertprobleme
- Gew. DGL. mit konst. Koeffizienten
- Partialbruchzerlegung
- transzendente Gleichungen

  z.B:

  $$ax + bx^3 = \tan x$$

Problem: $f(x)$ gegeben, gesucht x

mit $f(x) = 0$



Allg. Zugang:

finde Intervalle $[a,b]$ mit

$$f(a) \cdot f(b) < 0 \quad ; \quad f(a), f(b) \neq 0$$

$\Rightarrow \exists$ (mindestens) eine Nullstelle

$$x_0 \in (a,b)$$

a) Bisektion:

Gegeben $f(a_n) f(b_n) < 0$

Setze:

$$x' = \frac{a_n + b_n}{2}$$

Falls $f(a) \cdot f(x') < 0$

$\Rightarrow \quad b_{n+1} = x'$

sonst:

$$a_{n+1} = x'$$

Abbruch:

$|f(a)|, |f(b)| < \varepsilon$: Schranke;

Abbruchkriterium.

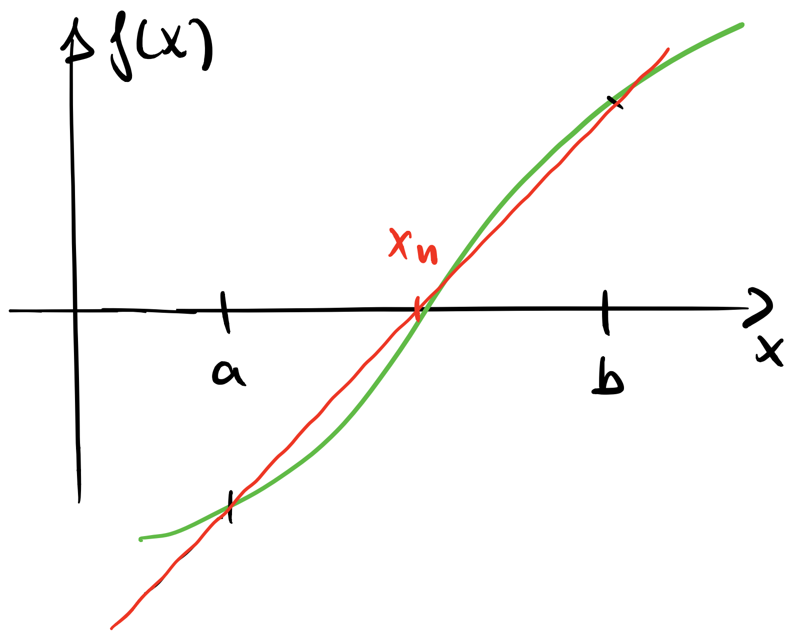
$\rightarrow$ Stabil, nicht effizient.

b) Regula falsi

Gegeben $f(a_n)\, f(b_n) < 0$:

Interpolation

$$f(x) \simeq f(a_n) + \frac{f(b_n) - f(a_n)}{b_n - a_n}(x - a_n) = 0$$



$\Rightarrow \quad f(a)\, f(x_n) < 0$

$\Rightarrow \quad a_{n+1} = x_n$

Konst

$$b_{n+1} = x_n$$

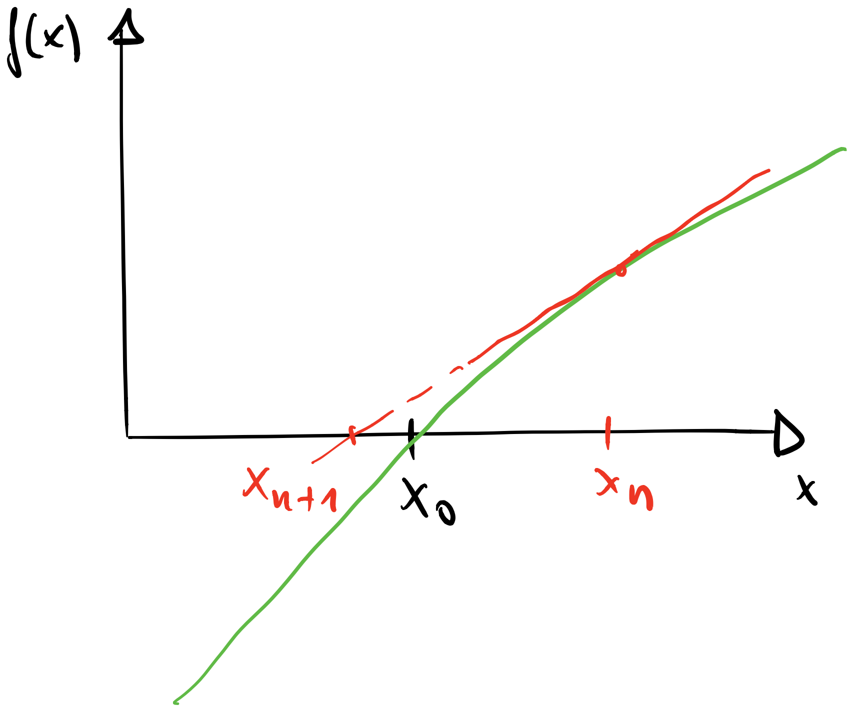
Bem:

- schneller als Intervallschachtelung
- stabil
- schwierig, wenn $f'(x_0)$ "klein"
  oder sogar $= 0$ in $[a,b]$

c) Newton–Raphson

x_n: n-te Abschätzung der Nullstelle

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}}$$



- schnell konvergent

- Problem: $f'(x)$ hat Nullstellen in der Nähe von x_0

  $\rightarrow$ x_{n+1} wird sehr groß

Bemerkungen:

- Hinweis: Vorher natürlich $f(x)$ skizzieren!
- Wie findet man alle Nullstellen?