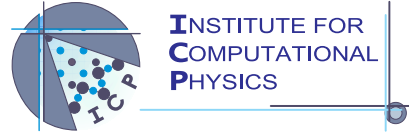




**Universität Stuttgart**



**I**NSTITUTE FOR  
**C**OMPUTATIONAL  
**P**HYSICS

# **Physik auf dem Computer**

Mitschriften zur Vorlesung  
Sommersemester 2017

Universität Stuttgart  
Fakultät 8: Fachbereich Physik  
B. Sc. Physik

12. April 2017



Dr. Jens Smiatek  
Institut für Computerphysik  
Universität Stuttgart  
Allmandring 3  
D-70569 Stuttgart  
Germany

Email: [smiatek@icp.uni-stuttgart.de](mailto:smiatek@icp.uni-stuttgart.de)



# Inhaltsverzeichnis

|          |  |          |
|----------|--|----------|
| <b>1</b> | <b>Motivation: Physik auf dem Computer</b>   | <b>3</b> |
| 1.1      | Warum Physik auf dem Computer? . . . . .   | 3        |
| 1.2      | Anwendung einer numerischen Methode zur Lösung der Bewegungsgleichung eines Fadenpendels (harmonischer Oszillator) . . . . . | 4        |
| 1.2.1    | Analytische Lösung mittels Näherung von kleinen Auslenkungen . . . . .   | 5        |
| 1.2.2    | Numerische Lösung mittels einer Simulation . . . . .   | 6        |
| <b>2</b> | <b>Literaturverzeichnis</b>  | <b>9</b> |



## Weiterführende Literatur

- Bronstein, Ilja N., et al. *Taschenbuch der Mathematik*. Eds. Eberhard Zeidler und Wolfgang Hackbusch. Springer-Verlag, Berlin 2012.
- Faires, J. Douglas und Burden, Richard L. *Numerische Methoden*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg 1994.
- Press, William H., et al. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, Cambridge 1989.





# 1 Motivation: Physik auf dem Computer

## 1.1 Warum Physik auf dem Computer?

Numerische Methoden werden in vielen Bereichen der modernen Physik eingesetzt. Als Paradebeispiel hierfür gilt die neue *Dreieinigkeits der Physik (New Trinity of Physics)* (Abb. 1.1). Neben den klassischen Disziplinen Theorie und Experiment wird seit Mitte

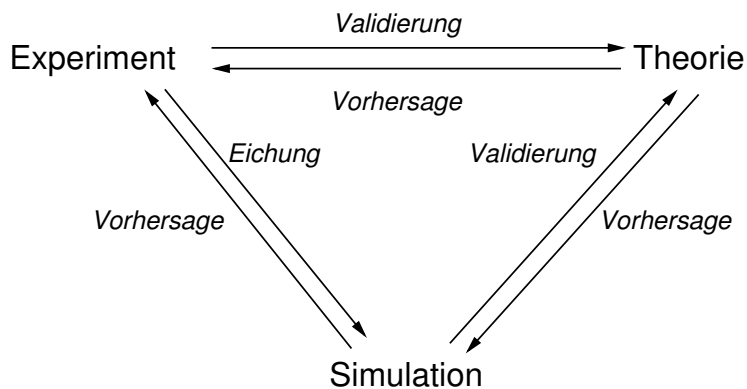


Abbildung 1.1: Die neue Dreieinigkeits der Physik mit den Säulen Experiment, Theorie und Simulation.

des letzten Jahrhunderts auch der Simulationsansatz als dritte Säule in der modernen Physik angesehen. Theorien können nun durch Experiment **UND** Simulation verifiziert werden! Dies ist insbesondere wichtig für Wissenschaftstheorien wie dem Kritischen Rationalismus [1], welcher durch Karl R. Popper (1902 - 1994) begründet wurde und als wesentliche Kernaussage darauf abzielt, dass eine Theorie falsifizierbar sein muss, da sie ansonsten keine Theorie darstellt.

### Einsatz von Rechnern und numerischen Methoden in der Theorie:

- numerische Lösungen von Gleichungen
- symbolische Mathematik (Mathematica<sup>©</sup>, ...)
- ...

**Einsatz von Rechnern und numerischen Methoden im Experiment:**

- Steuerung von Experimenten
- Auswertung von Daten
- ...



**Fazit:**

Computer und numerische Methoden werden in der modernen Physik in nahezu allen Bereichen eingesetzt.

**1.2 Anwendung einer numerischen Methode zur Lösung der Bewegungsgleichung eines Fadenpendels (harmonischer Oszillator)**

Im Folgendem soll nun ein einfaches Beispiel zur numerischen Lösung einer Bewegungsgleichung vorgestellt werden. Als Modellsystem dient das Fadenpendel (harmonischer

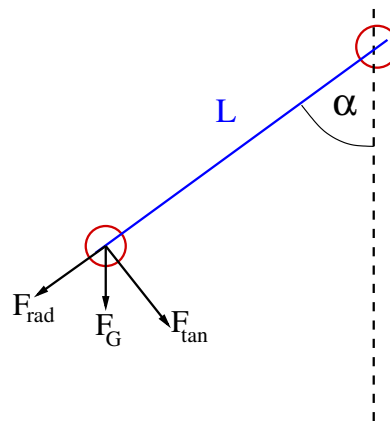


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung eines Fadenpendels.

Oszillator) in Abb. 1.2.

**Annahmen:**

- Steifer und masseloser Faden mit Länge  $L$
- Kugel mit Masse  $m$
- Es existiert keine Reibung im System (keine Energiedissipation)

**Vorherrschende Kräfte:**

- radiale Komponente  $F_{\text{rad}}$  (spielt keine Rolle für Bewegungsgleichung)
- Gravitation  $F_G = m \cdot g$  mit Erdbeschleunigung  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$
- tangentielle Kraft  $F_{\text{tan}} = m \cdot g \sin \alpha = m \cdot a$

Mittels Newton lässt sich die Rückstellkraft berechnen,

$$F_R = -F_{\text{tan}} = -m \cdot g \sin \alpha \tag{1.1}$$

welches

$$-m \cdot g \sin \alpha = m \cdot a \tag{1.2}$$


ergibt, wobei die Beschleunigung durch

$$a = -g \sin \alpha \tag{1.3}$$

gegeben ist. Die Tangentialbeschleunigung lässt sich auch mittels der Winkelbeschleunigung ausdrücken,

$$a = L\ddot{\alpha} \tag{1.4}$$

wodurch sich die allgemeine Bewegungsgleichung ergibt.

 **Allgemeine Bewegungsgleichung:**

$$\ddot{\alpha}(t) = -\frac{g}{L} \sin \alpha(t) = -\omega^2 \sin \alpha(t) \tag{1.5}$$

**1.2.1 Analytische Lösung mittels Näherung von kleinen Auslenkungen**

Eine analytische Lösung für  $\alpha(t)$  in Gleichung (1.5) kann für kleine Auslenkungen gefunden werden. Dann gilt  $\sin \alpha \approx \alpha$  und Gleichung (1.5) vereinfacht sich zu

$$\ddot{\alpha}(t) = -\frac{g}{L} \alpha(t) \tag{1.6}$$

wobei eine Lösung von Gleichung (1.6) die folgende Grundform

$$\alpha(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \tag{1.7}$$

mit Eigenfrequenz

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{L}} \tag{1.8}$$

darstellt. Die Vorfaktoren  $A$  und  $B$  können nun durch

1. Ruhelage: Auslenkung  $\alpha(t_0) = 0$  bei  $t_0 = 0 \rightarrow A = \alpha(t_0)$
2. Geschwindigkeit:  $\dot{\alpha}(t_0) = -\omega A \sin \omega t_0 + \omega B \cos \omega t_0 \rightarrow B = \frac{\dot{\alpha}(t_0)}{\omega}$

bestimmt werden. Nach Einsetzen von  $A$  und  $B$  in Gleichung (1.7) ergibt sich

$$\alpha(t) = \alpha(t_0) \cos \omega t + \frac{\dot{\alpha}(t_0)}{\omega} \sin \omega t \tag{1.9}$$

als allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung (1.6).

## 1.2.2 Numerische Lösung mittels einer Simulation

Wie bereits angemerkt wurde, ist Gleichung (1.9) für kleine Auslenkungen gültig. Wie löst man aber die volle Bewegungsgleichung (1.5)? Hierfür ist keine einfache Näherung möglich und keine einfache analytische Lösung gegeben.

Als möglicher Ausweg kann eine **numerische Lösung** mittels einer Simulation gefunden werden.

Um die Simulation numerisch stabil zu halten, ist es sinnvoll, Parameterwerte für  $g$  und  $L$  innerhalb der gleichen Größenordnung festzulegen. Da in obigem Beispiel die Erdbeschleunigung mit  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$  festgelegt ist, kann  $L = 1 \text{ m}$  gewählt werden, so dass sich die Eigenfrequenz  $\omega = \sqrt{g/L} \approx 3.13 \text{ s}^{-1}$  ergibt. Dies sollte die numerische Stabilität der Simulation gewährleisten. Allerdings tritt noch ein weiterer wichtiger Punkt bei Simulationen auf.



### Kernproblem von Simulationen:

Es existiert kein kontinuierlicher Zeitverlauf bei Simulationen und eine Diskretisierung der Zeit in diskrete Zeitintervalle ist unabdingbar.

Die Abfolge der Zeitintervalle ist durch

$$t_n = n \cdot \delta t \quad (1.10)$$

gegeben, wobei  $n = 0, \dots, N$  und  $\delta t$  die Breite des Zeitintervalls angibt. Das Ziel der Simulation ist nun, die allgemeine Bewegungsgleichung (1.5) numerisch zu lösen und als Funktion von  $\alpha(t_n)$  darzustellen. Als erster Schritt für die Anwendung einer Simulation bedarf es einer willkürlichen, aber vernünftigen Wahl der Ausgangsposition und der Ausgangsgeschwindigkeit in Gleichung (1.5).

Hierzu werden

$$\dot{\alpha}(t_0) = v(t_0) \quad (1.11)$$

als Ausgangsgeschwindigkeit und  $\alpha(t_0)$  als Ausgangsposition angenommen.

Als allgemeinen Ansatz wird eine Integration von Gleichung (1.5) durchgeführt, welche

$$\dot{\alpha}(t + \delta t) \equiv v(t_0 + \delta t) = v(t_0) + \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} [-\omega^2 \sin \alpha(\tau)] d\tau \quad (1.12)$$

ergibt. Die analytische Auswertung des Integrals ist jedoch in der Simulation nicht möglich, da nur die Stütz- und Auswertestellen bei ganzzahligen Vielfachen von  $\delta t$  bekannt sind oder berechnet werden können. Um dies zu ermöglichen und um die obige Gleichung numerisch handhabbar zu machen, wird folgende Näherung eingesetzt

$$f'(t) dt \approx f'(t) \lim_{\delta t \rightarrow 0} \delta t \quad (1.13)$$

welche zu

$$v(t_0 + \delta t) \approx v(t_0) - \omega^2 \sin \alpha(t_0) \delta t \quad (1.14)$$

führt, wobei  $v(t_0 + \delta t)$  natürlich umso exakter ist, je kleiner der Wert für  $\delta t$  gewählt wurde. Allerdings gibt es bei physikalischen Simulationen auch eine untere Schranke, bei der die Gesetze der Quantenmechanik gelten und der Begriff von klassischen Trajektorien nicht mehr gültig ist.

Um die neue Position zu berechnen, wird dann nochmals "integriert", welches

$$\alpha(t_0 + \delta t) \approx \alpha(t_0) + v(t_0) \delta t \quad (1.15)$$

ergibt. Durch sukzessive und iterative Abfolge der Gleichungen (1.14) und (1.15) kann nun die Trajektorie des System näherungsweise berechnet werden.

Um die Qualität der numerischen Lösung einschätzen zu können, bedarf es der Überprüfung einer unabhängigen und wohlbekannten Kenngrösse des Systems. Eine solche Kenngrösse stellt die Gesamtenergie dar, welche durch kinetische und potentielle Anteile festgelegt ist und welche per Definition konstant ist (s. Abschnitt 1.2).

Weitere Beispiele für den Einsatz von numerische Lösungen von Bewegungsgleichungen sind z. B. auch

- die Berechnung der Flugbahn eines Balls oder einer Rakete
- die Bewegung von Planeten im Sonnensystem
- die Kollision von harten Kugeln

Um die Bewegungsgleichungen noch realitätsnäher zu gestalten, können auch weitere Effekte wie Reibungskräfte in die Bewegungsgleichungen aufgenommen werden. Ebenso gibt es auch bessere Simulationsalgorithmen als die oben vorgestellte Variante. Ein vielfach in Simulationen eingesetzter Algorithmus ist der Velocity Verlet Algorithmus [3, 2] oder Varianten davon, welche folgende Grundabfolge aufzeigen:

1. Schritt: Berechnung der Geschwindigkeiten  $v(t + \delta t/2)$

$$v(t + \delta t/2) = v(t) + \frac{\delta t}{2m} F(t) \quad (1.16)$$

2. Schritt: Berechnung der neuen Positionen  $\alpha(t + \delta t)$

$$\alpha(t + \delta t) = \alpha(t) + \delta t v(t + \delta t/2) \quad (1.17)$$

3. Schritt: Berechnung der neuen Geschwindigkeiten  $v(t + \delta t)$

$$v(t + \delta t) = v(t + \delta t/2) + \frac{\delta t}{2m} F(t + \delta t) \quad (1.18)$$

und nach Schritt 3 der Algorithmus wieder bei Schritt 1 startet.

Trotz der universellen Anwendbarkeit von numerischen Lösungen gibt es immer aber einen Punkt zu beachten.



**Nicht vergessen:**

| Numerische Lösungen stellen immer nur approximative Lösungen dar!



## 2 Literaturverzeichnis

- [1] BÖHM, Jan M. ; HOOCK, Claudia ; POPPER, Karl R.: *Karl Poppers kritischer Rationalismus heute: zur Aktualität kritisch-rationaler Wissenschaftstheorie*. Tübingen, Deutschland : Mohr Siebeck, 2002
- [2] FRENKEL, Daan ; SMIT, Berend: *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Orlando, FL, USA : Academic Press, Inc., 1996
- [3] VERLET, Loup: Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. In: *Phys. Rev.* 159 (1967), Nr. 1, S. 98





## Weiterführende Literatur

- Bronstein, Ilja N., et al. *Taschenbuch der Mathematik*. Eds. Eberhard Zeidler und Wolfgang Hackbusch. Springer-Verlag, Berlin 2012.
- Faires, J. Douglas und Burden, Richard L. *Numerische Methoden*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg 1994.
- Press, William H., et al. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, Cambridge 1989.