

# Praktikum für Fortgeschrittene Computersimulationen

Thomas Luder

30. August 2011

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
1.1	Gegenstand des Praktikums . . . . .	2
1.2	Motivation . . . . .	2
1.3	Frage der Genauigkeit . . . . .	3
1.4	Aufgabenstellungen . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Verkehrssimulation</b>	<b>4</b>
2.1	Einleitung . . . . .	4
2.2	Aufgabenstellungen . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Eindimensionale Wärmeleitung</b>	<b>4</b>
3.1	Aufgabenstellung . . . . .	4
3.2	Herleitung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung . . . . .	5
3.2.1	Fluss von thermischer Energie: der Wärmestrom . . . . .	5
3.2.2	Veränderung der inneren Energie . . . . .	5
3.2.3	Veränderung der Temperatur . . . . .	5
3.2.4	Ursache eines Wärmeflusses . . . . .	6
3.2.5	Die Wärmeleitungsgleichung . . . . .	6
3.3	Analytische Lösungen der Wärmeleitungsgleichung . . . . .	7
3.3.1	Stationäre Wärmeleitung . . . . .	7
3.3.2	Zeitabhängige Wärmeleitung . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Klassisches Billard – statistische Verteilungen</b>	<b>9</b>
4.1	Aufgabenstellungen . . . . .	9
<b>A</b>	<b>Bemerkungen zum numerischen Lösen von (partiellen) Differentialgleichungen</b>	<b>10</b>
A.1	Finite Differenzen . . . . .	10
A.2	Anwendung auf die Wärmeleitungsgleichung . . . . .	12

# 1 Einleitung

## 1.1 Gegenstand des Praktikums

Das Hauptziel dieses Praktikums ist es physikalische Fragestellungen mit Hilfe von Computersimulationen zu behandeln. Computersimulationen im Sinne dieses Praktikums sind Programme auf einem Computer, deren Zweck es ist, ein quantitatives Modell eines Aspektes der Wirklichkeit zu sein. Der Computer wird deshalb benützt, weil in vielen Fragestellungen die Zahl der Rechenoperationen, welche nötig sind um eine Antwort von einem Modell zu erhalten, enorm gross sein kann.

Es ist möglich, bereits eine Tabelle in einem Tabellenkalkulationprogramm als numerische Simulation aufzufassen. Hingegen liegen die numerischen Modelle, welche wir hier betrachten, im Bereich zwischen der numerischen Berechnung eines Integrals (*numerische Quadratur*), der Simulation des morgigen Wetters, eines Lawinenniederganges, oder der Kraft-, Zug- und Druckverteilung des Herzmuskels während des Pumpens.

Da dieses Praktikum auch Personen ohne oder mit nur geringer Computererfahrung ansprechen soll, ist es ein weiteres Ziel den Einstieg in eben diese Welt zu ermöglichen.

Viele Probleme aus der Wissenschaft lassen sich mathematisch als Differentialgleichungen formulieren. Dabei ist zwischen den gewöhnlichen und den partiellen Differentialgleichungen zu unterscheiden. Die ersteren beinhalten nur Ableitungen nach einer Variablen, bei den zweiten kommen Ableitungen nach zwei oder mehr Variablen vor.

Verglichen mit einer gewöhnlichen Differentialgleichung ist das Lösen einer partiellen Differentialgleichung ungemein umständlicher. Umso häufiger beschränken sich Lösungsmethoden auf die numerische Behandlung. Allerdings ist auch der Aufwand, eine partielle Gleichung mit numerischen Methoden zu lösen, um einiges grösser als bei gewöhnlichen Differentialgleichungen. Beispielsweise muss bei partiellen Gleichungen darauf geachtet werden, dass eine benutzte Methode überhaupt zur angestrebten Lösung konvergiert. Unerwünschte Nebeneffekte können Oszillationen der numerischen Lösung sein, welche alleine durch die Methode eingeführt werden, nicht aber physikalischer Natur sind.

Ein anderes Problem bei numerischen Lösungsmethoden kann das Auftauchen von negativen Werten für Grössen sein, die aus physikalischen Gründen nicht negativ sein können, beispielsweise Konzentrationen oder Dichten. Zudem ist es oft mit erheblichem Aufwand verbunden, für ein gegebenes Problem eine Methode zu konstruieren, welche physikalische Erhaltungssätze (z.B. Energie, Impuls) nicht verletzt.

## 1.2 Motivation

Es zeigt sich, dass die numerische Modellierung in der heutigen Forschung eine zunehmend wichtige Position einnimmt. Das hängt damit zusammen, dass numerische Berechnungen mit dem Preiszerfall der Computer sehr kostengünstig geworden sind, und dass die wachsende Kapazität der Computer es erlaubt, immer komplexere Zusammenhänge zu simulieren, welche im Experiment nicht durchführbar sind oder grosse Kosten verursachen. Beispielsweise finden Crashtests bei Fahrzeugherstellern nicht mehr nur in Realität, sondern zum Teil rein in Computermodellen statt, welche die Physik eines Zusammenstosses abzubilden versuchen. Ein weiteres Beispiel liefert die Lebensmittelindustrie, wo numerische Modelle benutzt werden, um die zeitabhängige Konsistenz von künstlichen Nahrungsmitteln während der Kaubewegung zu untersuchen. Interessenten sei die Stellenbörse [www.cfd-online.com/Jobs/](http://www.cfd-online.com/Jobs/) empfohlen, welche

Stellenangebote nur für den Bereich der numerischen Simulation von Flüssigkeitsströmen auflistet.

### 1.3 Frage der Genauigkeit

Ein wichtiger Punkt ist, dass die Resultate einer Simulation kritisch hinterfragt werden, denn es ist verführerisch, den Resultaten eines Computermodells blind zu vertrauen. Bis die Aussagen eines Computerprogramms aber glaubhaft stimmen, ist es oft ein weiter Weg. Fehlerquellen und Diskrepanzen zur Realität können sich einschleichen durch

- ungenügende Abbildung der Physik im Modell. Zum Beispiel ist es notwendig aber nicht immer einfach, alle Terme derselben Ordnung in einer Reihenentwicklung zu berücksichtigen.
- eine unvorteilhafte numerische Methode. Beispielsweise kann eine Methode für bestimmte Parameterwerte zur Lösung konvergieren, für andere Parameterwerte hingegen nicht.
- Fehler im Programmcode, Fehler, die also nicht durch eine ungenügende Berücksichtigung der Physik oder der Mathematik auftreten, sondern zum Beispiel durch Vorzeichenfehler, oder weil ein Index bei 1 statt bei 0 anfängt, etc.

Der erste Schritt, Fehlerquellen zu erkennen, ist die Entwicklung eines Misstrauens gegenüber den eigenen Resultaten. Der zweite Schritt besteht dann darin, Tests durchzuführen. Im besten Fall kennt man von einem Problem die analytische Lösung, mit der das numerische Resultat verglichen werden kann. Allerdings würde in dieser Situation auch gar keine numerische Simulation durchgeführt. Immerhin ist es denkbar, dass die analytische Lösung für Spezialfälle bekannt ist. Eine weiterer Weg ist die Durchführung der Simulation mit variierender Auflösung. Da die Lösung nicht von der Auflösung abhängen darf, lassen sich damit positiv formuliert die Genauigkeit der Resultate abschätzen. Der negative Fall tritt ein, wenn die Resultate nach Veränderung der Auflösung zu stark von den ursprünglichen Werten abweichen, wenn mit anderen Worten jedes beliebige Resultat erhalten werden kann. In diesem Fall ist nach einem Fehler zu suchen. Der dritte Weg ist der Vergleich der Resultate mit einem unabhängigen Modell, welches unter Umständen mit geringem Aufwand für einen Spezialfall entwickelt werden kann. Viertens ist es nützlich, die Resultate physikalisch zu interpretieren. Auch wenn keine geschlossenen analytischen Aussagen vorliegen, können dennoch oft die Größenordnung der Resultate, zum Beispiel Zeitkonstanten oder typische Geschwindigkeiten, abgeschätzt werden und mit der Simulation verglichen werden. Ausserdem ist es oft möglich zu überprüfen, ob die Resultate qualitativ sinnvoll sind. Zum Beispiel soll bei der Simulation eines idealen Gases die Temperatur steigen, wenn der Druck erhöht und das Volumen konstant gehalten wird.

### 1.4 Aufgabenstellungen

Von den folgenden physikalischen Aufgabenstellung (Abschnitte 2 bis 4) ist *eine* auszuwählen und zu bearbeiten. Der Arbeitsaufwand der verschiedenen Aufgaben ist absichtlich unterschiedlich, um sowohl Personen mit wie auch ohne Erfahrung mit Computern und Programmiersprachen eine ansprechende Aufgabe zu stellen. Der physikalische Hintergrund ist bei allen vorgeschlagenen Problemstellungen recht einfach.

## 2 Verkehrssimulation

### 2.1 Einleitung

Die Simulation des Strassenverkehrs ist eine Anwendung, die in Zukunft an Bedeutung gewinnen wird. Mögliche Anwendungen sind zum Beispiel die Prognose von Stau analog zu Wettervorhersagen oder die Optimierung der Auslegung von Strassen anhand zu definierender Kriterien.

Zwei Ansätze werden heute zur Simulation des Verkehrs benutzt. Der eine beruht darauf, dass der Verkehrsfluss als Fluid aufgefasst werden und mit hydrodynamischen Gleichungen beschrieben werden kann. Der zweite Ansatz ist die Anwendung zellulärer Automaten. Dabei wird eine Strasse, beispielsweise die Spur einer Autobahn, in äquidistante Zellen unterteilt. Eine Zelle ist entweder von einem Fahrzeug besetzt oder sie ist leer. Mit jedem diskreten Zeitschritt werden die Fahrzeuge um eine ganze Zahl von Zellen vorwärtsbewegt. Diese Zahl ist durch die momentane Fahrzeuggeschwindigkeit gegeben, welche zum Beispiel abhängig ist von der Zahl der freien Zellen in Fahrtrichtung. Eine genauere und einfach nachvollziehbare Beschreibungen sind zum Beispiel in Schreckenberger et al. [1996] und Chowdhury et al. [2000] gegeben.

### 2.2 Aufgabenstellungen

Programmieren Sie einen zellulären Automaten, der den Verkehrsfluss einer ringförmigen, einspurigen Autobahn simuliert. Untersuchen Sie Staubildung, das sogenannte Fundamentaldia-gramm (Verkehrsfluss als Funktion der Fahrzeugdichte), die Verteilung des Abstandes zweier benachbarter Fahrzeuge, etc.

Vorschläge für weiterführende Untersuchungen sind (i) die Simulation einer zweispurigen Autobahn mit Überholvorgängen, und (ii) die Simulation eines zweidimensionalen geschlossenen Strassenetzes mit Ampeln oder anderen Vortrittsregelungen.

## 3 Eindimensionale Wärmeleitung

### 3.1 Aufgabenstellung

Wir betrachten das eindimensionale Temperaturfeld (das Temperaturprofil) in den obersten 10 bis 20 m des Erdbodens, welches aufgrund der Einstrahlung der Sonne in täglichem und jahreszeitlichem Rhythmus zeitabhängig ist.

- Vorbereitung: Leiten Sie einen analytischen, zeitabhängigen Ausdruck für den Zenitwinkel her, unter dem die Sonne an einer gegebenen geographischen Position auf eine horizontale Fläche scheint. Dabei ist die tägliche und die jährliche scheinbare Bewegung der Sonne zu berücksichtigen. Zur Zeit  $t = 0$  befinde sich die Sonne senkrecht über dem Äquator, und an der gegebenen Position sei Mittag, 12 Uhr Sonnenzeit.
- Schreiben Sie ein Programm, welches die zeitliche Entwicklung des Temperaturprofils unter dem Einfluss der Einstrahlung der Sonne und der thermischen Abstrahlung der Erdoberfläche simuliert. Die Abstrahlung ist durch  $\epsilon\sigma T^4$  gegeben, wobei  $\epsilon$  der Emissionskoeffizient im Infraroten,  $\sigma$  die Stefan-Boltzmann Konstante und  $T$  die Temperatur der Oberfläche ist. Wir nehmen an, dass die Oberfläche im Sichtbaren einen Albedo

$0 \leq a \leq 1$  aufweist, das heisst, dass nur der Anteil  $(1 - a)$  vom eingestrahnten Sonnenlicht absorbiert wird. Der Einfluss der Atmosphäre auf die Strahlungsenergieflüsse ist zu vernachlässigen. Eine Hilfe kann das Kapitel 6 in Gershenfeld [2000] sein.

Benutzen Sie verschiedene numerische Verfahren (explizite und implizite) und vergleichen Sie Vor- und Nachteile (sieh auch Anhang A).

Stellen Sie die Resultate in geeigneter Form grafisch dar. Während des Programmablaufs muss keine Grafik erzeugt werden.

- Vergleichen sie die Resultate, welche Sie erhalten wenn sich die Sonnenbewegung auf die tägliche Bewegung beschränkt, mit der analytischen Lösung. Diese wird im Abschnitt 3.3 hergeleitet. Diskutieren Sie die Unterschiede.

## 3.2 Herleitung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten den uns interessierenden Teil des Erdbodens als homogenen, starren Körper mit konstanter Dichte. Das heisst, dass erstens der Transport von thermischer Energie nur aufgrund von Wärmeleitung zustande kommt. Konvektionsströmungen und Energietransport in Form von Strahlung sind hingegen ausgeschlossen. Zweitens sind die Materialparameter, welche die Wärmeleitung beschreiben, nicht von der Tiefe  $z$  abhängig. Ausserdem untersuchen wir nicht die Temperaturverteilung auf der gesamten Oberfläche der Erdkugel, sondern nur in einer lokalen Umgebung. Diese sei genügend klein, dass alle relevanten Grössen nur von der Zeit und der Tiefe abhängen, dass also in horizontaler Richtung kein Temperaturgradient und kein Wärmefluss existiert.

### 3.2.1 Fluss von thermischer Energie: der Wärmestrom

Im Zeitintervall  $\Delta t$  fliesse durch die Querschnittsfläche  $A$  die Wärme  $Q$ . Der Wärmestrom  $j$  ist definiert durch

$$Q = A \Delta t j \quad (1)$$

und hat die Einheit  $\text{W}/\text{m}^2$ .

### 3.2.2 Veränderung der inneren Energie

Fliesst Wärme in ein Volumenelement  $\Delta V = \Delta z \cdot A$  hinein oder hinaus, ändert sich die innere Energie dieses Elementes. Der Nettofluss ist durch die Differenz der Wärmeströme an den beiden Stirnseiten des Volumenelementes gegeben, somit folgt sofort

$$\Delta U = -[Q(z + \Delta z) - Q(z)] = [j(z + \Delta z) - j(z)] \Delta t A. \quad (2)$$

### 3.2.3 Veränderung der Temperatur

Die Veränderung der inneren Energie  $\Delta U$  eines Massenelementes  $\Delta m = \rho A \Delta z$  ist mit einer Temperaturänderung  $\Delta T$  verbunden

$$\Delta U = c \Delta m \Delta T, \quad (3)$$

wobei  $\rho$  und  $c$  die Massendichte und die spezifische Wärmekapazität des Materials sind. Mit Gleichung (2) dürfen wir schreiben

$$c \rho A \Delta z \Delta T = -[j(z + \Delta z) - j(z)] \Delta t A. \quad (4)$$

Im Grenzübergang  $\Delta z \rightarrow 0$  und  $\Delta t \rightarrow 0$  ergibt sich daraus

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial z}, \quad (5)$$

die zeitliche Änderung der Temperatur kommt durch die räumliche Inhomogenität des Wärmestroms zustande.

Es ist instruktiv, dies mit der Massen-Kontinuitätsgleichung in drei Raumdimensionen

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}_m = 0 \quad (6)$$

zu vergleichen, die aus der Erhaltung der Masse folgt. Dabei ist  $\mathbf{j}_m$  der Massenstrom, der zu einer Veränderung der Massendichte führt. Der Faktor  $c\rho$  (Wärmekapazität pro Volumen), welcher in (5) aber nicht in (6) auftaucht, dient lediglich dazu, dass auf der einen Seite der Gleichung die Temperatur, auf der anderen Seite der Strom der Energie geschrieben werden kann. Die formale Gleichheit der Gleichungen (6) und (5) ist nicht zufällig. Beide beruhen darauf, dass eine Grösse (innere Energie beziehungsweise die Masse) in einem Volumen nur ändert, wenn ein Strom (Wärmestrom oder Massenstrom) über den Rand des Volumens fließt. Achtung: diese Voraussetzung gilt bei der inneren Energie nur, wenn Wärmequellen z.B. durch Dissipation oder chemische Reaktionen ausgeschlossen werden können. Andernfalls müsste die Gleichung um Quell- und Senkterme erweitert werden.

### 3.2.4 Ursache eines Wärmeflusses

Hervorgerufen wird ein Fluss von thermischer Energie in einem Körper durch örtliche Temperaturunterschiede. Nach Fouriers Ansatz ist der Fluss proportional zum Temperaturgradienten

$$j(z, t) = -k \frac{\partial T(z, t)}{\partial z}. \quad (7)$$

Die Proportionalitätskonstante  $k$  heisst Wärmeleitfähigkeit und ist vom Material abhängig. Das negative Vorzeichen drückt aus, dass der Energiefluss in Richtung des negativen Gradienten stattfindet.

### 3.2.5 Die Wärmeleitungsgleichung

Die Kombination der Gleichungen (5) und (7) ergibt die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{c\rho} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (8)$$

Der Quotient  $K = k/(c\rho)$  heisst Temperaturleitfähigkeit. Die Wärmeleitungsgleichung ist ein Vertreter der partiellen Differentialgleichungen. Viele Probleme der Physik führen auf Gleichungen, die eine erste Ableitung nach der Zeit und eine zweite Ableitung nach dem Ort enthalten. Häufig sind dies Transportphänomene. Ihre Charakteristik ist, dass erstens ein Gradient eines Stromes eine zeitliche Änderung einer Quantität bewirkt, was im wesentlichen die Aussage der Kontinuitätsgleichung ist, und dass zweitens der Strom durch den Gradienten ebendieser Quantität ausgelöst wird. Dieser Grundtypus kommt beispielsweise ebenfalls in der Diffusion vor. Die Diffusionsgleichung für eine Konzentration  $c$  eines Stoffes in einer Flüssigkeit (beispielsweise Zucker in Wasser)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \Delta c \quad (9)$$

mit dem Diffusionskoeffizienten  $D$  ist formal mit (8) identisch.

Andere Fragestellungen, die auf Gleichungen der Art (9) führen, sind die Leitung von elektrischen Ladungen<sup>1</sup> und der Austausch von Impuls zwischen Flüssigkeiten mit unterschiedlicher Geschwindigkeit aufgrund der Viskosität.

Gleichungen des Typs (8) kommen jedoch nicht vor, wenn ein Gradient einer Quantität keinen Strom nach dem Ansatz von Fourier auslöst. Zum Beispiel diffundieren die Planeten nicht im Sonnensystem herum. Die Bewegung der Masse folgt hier nach den Gesetzen der Gravitation, diese ist jedoch nicht bestrebt, einen Dichtegradienten auszugleichen.

### 3.3 Analytische Lösungen der Wärmeleitungsgleichung

#### 3.3.1 Stationäre Wärmeleitung

Damit eine Lösung einer partiellen Differentialgleichungen definiert ist, müssen neben den Anfangsbedingungen auch die Randbedingungen gegeben sein. Das Analogon bei den gewöhnlichen Differentialgleichungen ist das Festlegen der Anfangsbedingung und der (In-) Homogenität.

Am Beispiel der Wärmeleitungsgleichung lässt sich dies einfach nachvollziehen. Wir betrachten dazu einen wärmeleitenden Stab. Eine Möglichkeit der Vorgabe der Randbedingungen ist, die Enden des Stabes als isolierend gegen aussen zu betrachten. Daraus folgt, dass die totale innere Energie des Stabes konstant bleibt. Innere Wärmeflüsse sorgen dafür, dass sich im Stab anfänglich vorhandene Temperaturunterschiede ausgleichen und im gesamten Stab nach einer genügend langen Zeit eine mittlere Temperatur herrscht. Eine zweite Möglichkeit ist es, beide Stabenden, beispielsweise mit einem externen Wärmebad, auf eine vorgegebene Temperatur zu setzen. Induzierte interne Wärmeflüsse werden darauf den Temperaturverlauf im Innern des Stabes anpassen, bis überall die gleiche Temperatur herrscht. Der Unterschied zum ersten Fall ist, dass Energie in den Stab hinein oder aus ihm hinaus fließt. Die Gemeinsamkeit beider Fälle ist, dass sich nach genügend langem Warten ein thermodynamisches Gleichgewicht einstellt und keine makroskopischen Wärmeflüsse mehr stattfinden.

Ein in dieser Hinsicht anderer Fall liegt vor, wenn die beiden Stabenden auf unterschiedlichen Temperaturen gehalten werden. Nun bildet sich ein stationärer Zustand aus, bei dem die Temperatur entlang des Stabes linear vom einen zum anderen Ende zunimmt. Die stationäre Temperaturverteilung bleibt zwar konstant, aber um dieses aufrechtzuerhalten fließt ein stetiger konstanter Wärmefluss vom heisseren Stabende in den Stab, durch den Stab und schliesslich am anderen Ende wieder aus dem Stab heraus.

In diesen drei Fällen lässt sich die entstehende Situation analytisch einfach beschreiben, solange wir nur am Endzustand, nicht aber an der dynamischen Entwicklung, die zu diesem Endzustand führt, interessiert sind. Alle drei Fälle sind dadurch charakterisiert, dass im Endzustand keine Temperaturänderungen mehr stattfinden. Formal heisst das  $\partial T / \partial t = 0$ . Durch Einsetzen in die Wärmeleitungsgleichung (8) erhalten wir die stationäre Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{d^2 T(z)}{dz^2} = 0 \quad (10)$$

Offensichtlich ist die Lösungsschar durch  $T(z) = T_0 + q \cdot z$  gegeben. Aus den entsprechenden Randbedingungen ergeben sich damit sofort die oben gefundenen Temperaturverteilungen.

---

<sup>1</sup>Siehe zum Beispiel das Kapitel 18. *Signale im Leiter* des Elektrodynamikskripts von H. Leutwyler.

### 3.3.2 Zeitabhängige Wärmeleitung

Nicht nur statisch oder stationär ist die Situation,

Wenn die Erdoberfläche durch die Sonne periodisch Energie zugeführt bekommt und in der Nacht Energie abstrahlt, ist die Situation nicht mehr statisch oder stationär. In diesem Fall sind die Randbedingungen Funktionen der Zeit. Die Energieflüsse unterhalb der Oberfläche werden zeitabhängig, und deshalb kann es auch keine stationäre Lösung mehr geben.

Eine Möglichkeit, die Wärmeleitungsgleichung unter diesen Randbedingungen zu lösen, ist der Separationsansatz

$$T(t, z) = M(z) \cdot N(t). \quad (11)$$

Wir suchen also nach Lösungen, die sich als Produkt zweier Funktionen darstellen lassen, wobei die eine Funktion  $M$  nur von der Tiefe  $z$  und die Funktion  $N$  nur von der Zeit  $t$  abhängt. Die Motivation für diesen Ansatz ist zunächst nur die Erfahrung, dass er in vielen Fällen zu einer Lösung führt. Als Konvention legen wir fest, dass die  $z$ -Achse nach unten orientiert ist,  $z = 0$  ist die Höhe der Erdoberfläche, und Energieflüsse in die Richtung der positiven  $z$ -Achse sind positiv, andernfalls negativ.

Das Einsetzen des Separationsansatzes in die Wärmeleitungsgleichung (8) führt uns auf

$$\frac{\dot{N}(t)}{N(t)} = K \cdot \frac{M''(z)}{M(z)} \quad (12)$$

Die linke Seite ist unabhängig von  $z$ , die rechte unabhängig von  $t$ , also sind beide Seiten konstant in  $t$  und  $z$ . Deswegen dürfen wir schreiben

$$\frac{\dot{N}(t)}{N(t)} = C = K \cdot \frac{M''(z)}{M(z)} \quad (13)$$

mit einer beliebigen Konstanten  $C$ . Lösungen für die beiden Funktionen sind  $M(t) = \hat{M} \exp(Ct)$  und  $N(z) = \hat{N} \exp(\sqrt{C/K}z)$ . Aus mathematischer Sicht darf  $C$  eine beliebige komplexe Zahl sein. Falls  $C$  einen verschwindenden Imaginärteil hat, wird die Lösung für  $N$  jedoch unphysikalisch, sie explodiert mit  $z$ . Es ist ausserdem vernünftig, dass die Zeitabhängigkeit periodisch ist, weil das unserem Ziel, eine in der Zeit periodische Energiezufuhr und -abgabe an der Erdoberfläche zu betrachten, entgegenkommt. Deswegen beschränken wir uns auf eine rein imaginäre Konstante und substituieren  $C = i\omega$  mit reellem  $\omega$ . Damit werden die gefundenen Lösungen

$$M(t) = \hat{M} \exp(i\omega t) \quad N(z) = \hat{N} \exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{K}}z\right) \quad (14)$$

Das Vorzeichen des Realteils der Wurzel im Exponenten muss aus physikalischen Gründen negativ gewählt werden, damit  $N(z)$  nicht explodiert. Wir wählen deswegen die Vorzeichen

$$\begin{aligned} N(z) &= \hat{N} \exp\left(\frac{-1-i}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{|\omega|}{K}}z\right) & (\omega > 0) \\ N(z) &= \hat{N} \exp\left(\frac{-1+i}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{|\omega|}{K}}z\right) & (\omega < 0). \end{aligned} \quad (15)$$



Wegen der Linearität der Wärmeleitungsgleichung sind ein Vielfaches einer Lösung und die Summe zweier Lösungen wiederum eine Lösung der Gleichung. Damit finden wir, dass

$$T(t, z) = \int_0^{+\infty} d\omega B_+(\omega) \cdot \exp\left(i\omega t + \frac{-1-i}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\omega}{K}} z\right) + B_-(\omega) \cdot \exp\left(-i\omega t + \frac{-1+i}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\omega}{K}} z\right) \quad (16)$$

eine Lösung ist, was als Fourierzerlegung in der Zeit  $t$  aufgefasst werden kann. Anhand von (16) suchen wir nun die Lösung, welche der reellen harmonischen Randbedingung

$$T(t, z = 0) = \hat{T} \cdot \cos(\omega_0 t) \quad (17)$$

genügt. Offenbar ist dies die Summe

$$\begin{aligned} T(t, z) &= \hat{T} \exp\left(i\omega_0 t + \frac{-1-i}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\omega_0}{K}} z\right) + \hat{T} \exp\left(-i\omega_0 t + \frac{-1+i}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{\frac{\omega_0}{K}} z\right) \\ &= \hat{T} \exp\left(-\sqrt{\frac{\omega_0}{2K}} \cdot z\right) \cdot \cos\left(\omega_0 t - \sqrt{\frac{\omega_0}{2K}} \cdot z\right) \end{aligned} \quad (18)$$

Die Interpretation ist, dass eine harmonische Temperaturänderung an der Erdoberfläche in der Tiefe  $z$  phasenverschoben und gedämpft wahrgenommen wird. Die Zeitverschiebung beträgt

$$\Delta t(z) = \frac{z}{\sqrt{2\omega_0 K}}, \quad (19)$$

und die Dämpfung beläuft sich auf den Faktor

$$\exp\left(-\sqrt{\frac{\omega_0}{2K}} \cdot z\right). \quad (20)$$

Beide sind von der Anregungsfrequenz  $\omega_0$  abhängig.

## 4 Klassisches Billard – statistische Verteilungen

### 4.1 Aufgabenstellungen

Simulieren sie die Bewegung einer gegebenen Zahl von Kugeln (10, 100, 1000) in einem dreidimensionalen quaderförmigen Behälter. Ausser den Kugeln befinde sich nichts im Behälter, und Gravitation soll vernachlässigt werden. Damit bewegt sich jede Kugel zwischen zwei Stößen geradlinig gleichförmig. Stöße finden statt zwischen den Kugeln und zwischen Wänden und Kugeln. Alle Stöße seien elastisch, das heisst, dass die totale kinetische Energie erhalten bleibt. Mögliche Aufgabenstellungen sind:

- Untersuchen Sie, ob sich bei gegebenem Volumen des Kubus, gegebener Teilchenzahl und gegebener totaler Energie ein Druck auf die Kubuswand ergibt, der mit der Zustandsgleichung für ideale Gase übereinstimmt.
- Untersuchen Sie, nach wievielen Stößen die Teilchen ihre ursprüngliche Geschwindigkeit vergessen haben. Stellen sie ein Histogramm der Geschwindigkeiten der Teilchen her und vergleichen Sie dieses mit einer Maxwell-Boltzmann Verteilung.

- Untersuchen sie die Anzahl der Teilchen in einem Teilvolumen des Kubus und vergleichen Sie mit Aussagen der statistischen Thermodynamik über die Fluktuationen der Teilchenzahl in einem offenen System<sup>2</sup>.
- Untersuchen Sie das Diffusionsverhalten einer Untermenge der Teilchen. Bestimmen Sie einen Diffusionskoeffizienten und vergleichen Sie mit dem theoretischen Ausdruck.
- Untersuchen Sie, ob sich die Gesamtheit der Teilchen gemäss der Zustandsgleichung nach Van der Waals verhalten, wenn die Summe der Teilchenvolumen nicht mehr vernachlässigbar klein gegen das Volumen im Kubus ist.

## A Bemerkungen zum numerischen Lösen von (partiellen) Differentialgleichungen

### A.1 Finite Differenzen

Neben vielen anderen numerischen Techniken sind *finite Differenzen* und *finite Elemente* zwei Techniken, um Differentialgleichungen numerische zu lösen.

- Die “Finite Elemente” Methode ist vor allem in den Ingenieurwissenschaften sehr verbreitet, in der Physik aber nicht oft anzutreffen. Sie eignet sich für die Behandlung von Problemen mit komplizierter Geometrie, bei der vorkommende Körper durch ein unregelmässiges Gitter aus unregelmässigen Tetraedern dargestellt werden. Eine grosse Herausforderung ist in diesem Zusammenhang bereits das Aufstellen des Gitters. Ein Beispiel ist die Berechnung von Kräften im Schädel und der Wirbelsäule eines Autofahrers bei einem Auffahrunfall ([www.agu.ch](http://www.agu.ch)). Diese Methode wird hier nicht weiter besprochen.
- Die “Finite Differenzen” Methode basiert darauf, dass (partielle) Ableitungen durch endliche Differenzen von Funktionswerten an diskreten Stellen in der Umgebung des Punktes approximiert werden, an dem die Ableitung interessiert. Zu dieser Methode werden im folgenden einige Bemerkungen gemacht.

Die Darstellung der numerischen Werte einer Funktion einer kontinuierlichen Variable stellt einen Computer vor ein Problem, denn eine solche Darstellung erfordert unendlich viel Speicherplatz. Deswegen muss sich ein Programm darauf beschränken, Aussagen über die Funktion an diskreten Stellen zu machen.

Dieses Problem stellt sich mit jeder Variablen, von der die Funktion abhängig ist. Beispielsweise entsteht durch die Diskretisierung ganz automatisch ein zweidimensionales Gitter bei Problemen mit einer Zeit- und einer Raumdimension. Wir nehmen hier der Einfachheit halber an, dass dieses Gitter in beiden Dimensionen äquidistant sei. ( $x_{k+1} - x_k = \Delta x = \text{const}$ ,  $t_{n+1} - t_n = \Delta t = \text{const}$ ), wobei  $x_k$  und  $t_n$  die diskreten Orte und Zeiten seien. Zur Vereinfachung der Notation führen wir die Schreibweise

$$f_k^n := f(n \cdot \Delta t, k \cdot \Delta x). \quad (21)$$

für den Funktionswert an der Stelle  $(n \cdot \Delta t, k \cdot \Delta x)$  ein.

---

<sup>2</sup>Siehe zum Beispiel Bebie Skript: Statistische Thermodynamik II.

In einer Differentialgleichung kommen Ableitungen wie  $\partial f(t, x)/\partial x$  vor. Es ist das Wesen der finiten Differenzen, solche Ableitungen mit geeigneten Kombinationen von Funktionswerten zu beschreiben.

Zu diesem Zweck betrachten wir die die Taylorapproximation

$$f_{k+1}^n = f_k^n + \Delta x \cdot \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} + O(\Delta x^2) \quad (22)$$

Offenbar können wir daraus einen Ausdruck für die erste Ableitung nach  $x$  gewinnen:

$$\left( \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \right)_k^n = \frac{f_{k+1}^n - f_k^n}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (23)$$

Der Fehler dieser Approximation ist von der Grössenordnung von  $\Delta x$  und kann damit im Prinzip beliebig klein gemacht werden. Enthält ein Verfahren Ausdrücke der Art der rechten Seite, so wird es Verfahren erster Ordnung in  $x$  genannt. Gehen wir aber von der Taylorapproximation

$$f_{k-1}^n = f_k^n - \Delta x \cdot \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} + O(\Delta x^2) \quad (24)$$

aus, so finden wir einen alternativen Ausdruck für die erste Ableitung

$$\left( \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \right)_k^n = \frac{f_k^n - f_{k-1}^n}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (25)$$

der ebenfalls erster Ordnung ist. Gemeinsam für beide Ansätze ist, dass sie auf ein Zweipunktverfahren führen (es werden zwei benachbarte Punkte aus der Umgebung benutzt), und dass sie erster Ordnung sind.

Wir wollen nun einen Ausdruck zweiter Ordnung für die Ableitung nach  $x$  konstruieren. Dazu soll vom Ansatz  $a f_{k-1}^n + b f_k^n + c f_{k+1}^n$  ausgegangen werden. Die Konstanten  $a$ ,  $b$  und  $c$  sind zunächst unbekannt, die Aufgabe besteht darin, diese geschickt zu bestimmen. Wir benutzen wiederum die Taylornäherungen für  $f_{k-1}^n$  und  $f_{k+1}^n$ , brechen aber erst bei der vierten Ordnung ab, und setzen in die obige Summe ein. Nach Ordnen nach Ableitungen erhalten wir

$$\begin{aligned} a f_{k-1}^n + b f_k^n + c f_{k+1}^n &= (a + b + c) f_k^n + (-a + c) \Delta x \left( \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \right)_k^n + \\ &+ (a + c) \frac{\Delta x^2}{2} \left( \frac{\partial^2 f(t, x)}{\partial x^2} \right)_k^n + \\ &+ (a - c) \frac{\Delta x^3}{6} \left( \frac{\partial^3 f(t, x)}{\partial x^3} \right)_k^n + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (26)$$

Die Idee besteht nun darin, dass die rechte Seite die erste Ableitung nach  $x$  darstellen soll. Wir wählen  $a$ ,  $b$  und  $c$  also so, dass die Koeffizienten möglichst vieler anderer Terme verschwinden. Wie erhalten die Gleichungen

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ (-a + c) \Delta x &= 1 \\ a + c &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

Daraus folgt unmittelbar die Darstellung

$$\left(\frac{\partial f(t, x)}{\partial x}\right)_k^n = \frac{f_{k+1}^n - f_{k-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (28)$$

Die Ordnung des Fehlers ist nun zwei, es handelt sich also um ein Schema zweiter Ordnung. Derselbe Ansatz führt als Ausdruck für die zweite Ableitung auf

$$\left(\frac{\partial^2 f(t, x)}{\partial x^2}\right)_k^n = \frac{f_{k+1}^n - 2f_k^n + f_{k-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (29)$$

Übung: Leiten sie dies her und erklären Sie damit, wieso der Fehlerterm zweiter und nicht erster Ordnung in  $\Delta x$  ist.

Mit einem Ansatz, der mehr als drei Stützpunkte berücksichtigt, lässt sich im Prinzip ein Schema höherer Ordnung herstellen. Dabei stellen sich aber mindestens zwei Probleme. Da einerseits eine grosse Zahl von Termen auszuwerten ist, dauert die Berechnung vergleichsweise lange. Andererseits bedeuten viele Stützpunkte, dass Information aus einer grösseren Umgebung in die Bestimmung der Ableitung einfliesst. Dadurch geht die Lokalität der Ableitung verloren, was sich vor allem in der Nähe von nicht schön flachen Funktionen, insbesondere bei Sprüngen negativ auswirkt.

## A.2 Anwendung auf die Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten die Diffusionsgleichung in einer Dimension

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(t, x)}{\partial x^2} \quad (30)$$

mit Dirichlet Randbedingungen  $f(t, x = 0) = b(t)$ , wobei  $b(t)$  eine gegebene Funktion ist, beispielsweise  $b(t) = 0$ . Mit den im Abschnitt A.1 gegebenen Methoden stellen wir die Ableitung nach der Zeit und dem Ort dar, wobei wir in beiden Fällen die Ausdrücke zweiter Ordnung wählen, und erhalten

$$\frac{f_k^{n+1} - f_k^{n-1}}{2\Delta t} = D \frac{f_{k-1}^n - f_k^n + f_{k+1}^n}{\Delta x^2}. \quad (31)$$

Wie die Stabilitätsanalyse nach Neumann (siehe dazu z.B. Gershenfeld [2000, p. 79]) zeigt, ist dieses Verfahren numerisch jedoch instabil. Übung: zeigen Sie dies.

Das Verfahren wird bedingt stabil, wenn wir für die Zeitableitung ein Schema erster Ordnung wählen:

$$\frac{f_k^{n+1} - f_k^n}{\Delta t} = D \frac{f_{k-1}^n - f_k^n + f_{k+1}^n}{\Delta x^2}. \quad (32)$$

Führen Sie auch hier eine Stabilitätsanalyse durch. Das Resultat ist, dass

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2D} \quad (33)$$

sein muss, damit die Stabilität gewährt bleibt. Dieses Kriterium schreibt eine obere Schranke für den Zeitschritt  $\Delta t$  bei gegebener Ortsauflösung  $\Delta x$  vor. Das Problem dabei ist, dass die aufzuwendende Rechenzeit gross sein kann. Die Zeit, welche es braucht, bis sich ein Signal

durch Diffusion um eine Strecke  $L$  ausgebreitet hat, beträgt etwa  $L^2/D$ . Durch die Begrenzung (33) ergibt sich, dass die totale Zahl der Zeitschritte etwa  $L^2/(\Delta x)^2 \gg 1$  betragen muss. Das Problem kann auch anders ausgedrückt werden: Soll die räumliche Auflösung um einen Faktor 2 verbessert werden, muss nach der Einschränkung (33)  $\Delta t$  zwingend um den Faktor 4 verkleinert werden. Das heisst, dass etwa 8 mal mehr gerechnet werden muss. Fazit: Das Verfahren funktioniert numerisch, es kann aber langsam sein.

Ein Ausweg aus diesem Problem sind implizite Verfahren (Gershenfeld, 2000, p. 82). Implizite Verfahren sind solche Verfahren, bei denen der Funktionswert an einer Stelle zu einer neuen Zeit  $t + \Delta t$  nicht nur durch die Funktionswerte zu einer vorhergehenden Zeiten gegeben ist, sondern von Funktionswerte aus der Umgebung zur neuen Zeit abhängen. Diese Abhängigkeit führt auf Matrixgleichungen, die sich jedoch mit einem Kniff recht einfach lösen lassen. Bezüglich der Stabilität sind Implizite Verfahren den Expliziten oft überlegen, beispielsweise, dass keine Beschränkung für den Zeitschritt  $\Delta t$  aus Stabilitätsgründen vorliegt.

## Literatur

- [1] Chowdhury, D., Santen, L., A. Schadschneider, Simulation of Vehicular Traffic: A Statistical Physics Perspective, *Computing in Science and Engineering*, **2**, 80-87, 2000
- [2] Gershenfeld, N., The Nature of Mathematical Modeling, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000
- [3] Kühne, R., Verkehrsablauf auf Fernstrassen, Autofahren als Beispiel für nichtlineare Dynamik, *Phys. Bl.*, **47**, 201-204, 1991
- [4] Schreckenberger, M., A. Schadschneider, K. Nagel, Zellularautomaten simulieren Strassenverkehr, *Phys. Bl.*, **52**, 460-462, 1996