

# Theoretische Physik I:

## Vorlesung 14: Numerische Methoden



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DARMSTADT

Wie wir klassische Mechanik Probleme lösen:

- ▶ gute Koordinaten finden
- ▶ Lagrangefunktion rechnen
- ▶ Bewegungsgleichungen (Euler-Lagrange) finden
- ▶ **Bewegungsgleichungen, mit Anfangsbedingungen, lösen**

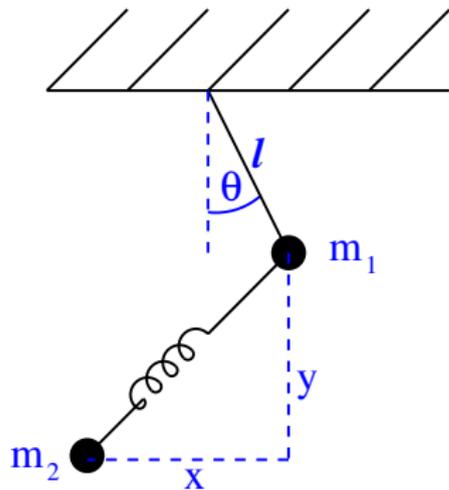
Sehr oft können wir die Bewegungsgleichungen nur numerisch lösen.

Deshalb müssen wir numerische Methoden diskutieren.

Heute diskutieren wir dieses Problem.

Dann sehen wir die Eigenschaften der Lösungen: Chaos.

## 2: Beispielproblem



Ich werde diese Konzepte an einem Beispiel erläutern. Von einem Pendel, Länge  $\ell$  und Masse  $m_1$ , hängt noch ein Pendel, mit Masse  $m_2$ . Das zweite Seil ist eine Feder mit Federkonstante  $D$  und der ungestörten Länge  $r$ .

Lagrangefunktion: 
$$L = \frac{m_1 \ell^2}{2} \dot{\theta}^2 + \frac{m_2}{2} ((\dot{x} + \ell \cos(\theta) \dot{\theta})^2 + (\dot{y} - \ell \sin(\theta) \dot{\theta})^2) + m_1 g \ell \cos(\theta) + m_2 g (\ell \cos \theta + y) - \frac{D}{2} (\sqrt{x^2 + y^2} - r)^2$$

### 3: Bewegungsgleichungen



Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = \frac{\partial L}{\partial \theta}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = \frac{\partial L}{\partial y}$$

+ viel Algebra



$$m_1 \ell^2 \ddot{\theta} = -(m_1 + 2m_2)g\ell \sin(\theta) + D\ell(x \cos(\theta) - y \sin(\theta)) \left(1 - \frac{r}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \equiv A(\theta, x, y)$$

$$m_2 \ddot{x} = -m_2 \ell \cos(\theta) A(\theta, x, y) + m_2 \ell \sin(\theta) \dot{\theta}^2 - Dx \left(1 - \frac{r}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right)$$

$$m_2 \ddot{y} = m_2 \ell \sin(\theta) A(\theta, x, y) + m_2 \ell \cos(\theta) \dot{\theta}^2 - Dy \left(1 - \frac{r}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right)$$

Diese Gleichungen sind gemischt und nicht linear. Was machen wir jetzt?

## 4: Unser Problem

Wir haben ein System von 3 (im Allgemeinen,  $N$ ) gekoppelte 2. Ordnung gewöhnliche Differentialgleichungen.

Ich brauche  $6 (2N)$  Zahlen als Anfangsdaten:  $x(t_0), \dot{x}(t_0), y(t_0), \dot{y}(t_0), \theta(t_0), \dot{\theta}(t_0)$   
 $(q_i(t_0), \dot{q}_i(t_0))$

Bei  $N$  Koordinaten (Freiheitsgrade) und  $\geq N$  Erhaltungsgrößen kann ich die Gleichungen oft lösen. Aber sobald es mehrere Koordinaten als Erhaltungsgrößen gibt, kann ich normalerweise die Gleichungen nicht analytisch lösen.

Was soll ich machen, wenn ich eine Antwort haben will?

Wie kann ich solche Systeme (numerisch) lösen?

Ich brauche eine systematische Methodik.

## 5: Problem in 1. Ordnung gDGI umschreiben



- ▶ Systeme von 2. Ordnung gDGI als Systeme  
⇒ 1. Ordnung gDGI umschreiben
- ▶ Methoden entwickeln, um 1. Ordnung gDGI zu lösen

Wir nennen  $\dot{\theta} \equiv a$ ,  $\dot{x} = b$ , und  $\dot{y} = c$ . Unsere Anfangsdaten sind die Werte für  $\theta, x, y, a, b, c$ . 3 unserer 6 Gleichungen sind

$$\dot{\theta} = a$$

$$\dot{x} = b$$

$$\dot{y} = c$$

Drei weitere 1-Ordnung gDGI sind die 2. Ordnung gDGI, die wir schon gefunden haben,

aber mit  $\ddot{\theta} \rightarrow \dot{a}$ ,  $\ddot{x} \rightarrow \dot{b}$ ,  $\ddot{y} \rightarrow \dot{c}$ ,  $\dot{\theta} \rightarrow a$ , usw:

$$m_1 \ell^2 \dot{a} = A(\theta, x, y)$$

$$m_2 \dot{b} = -m_2 \ell \cos(\theta) A(\theta, x, y) + m_2 \ell \sin(\theta) a^2 - Dx \left( 1 - \frac{r}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \dots$$

Wenn ich Systeme von 1. Ordnung gDGI lösen kann, kann ich alle gDGI lösen.

## 6: Euler'sche Methode

Einfach zu verstehen, einfach zu benutzen, nicht sehr gut: **Euler'sche Methode**

Betrachten Sie:  $\dot{a} = f_1(a, b, \dots)$ ,  $\dot{b} = f_2(a, b, \dots)$ , ...

Ich gehe in kleinen Schritten durch Zeit:  $a(t) \rightarrow a(0), a(\Delta), a(2\Delta), a(3\Delta), \dots$  mit  $\Delta$  klein. Wir haben:

$$a(t + \Delta) = a(t) + \int_t^{t+\Delta} \dot{a}(t') dt' = a(t) + \int_t^{t+\Delta} f(a(t'), b(t'), \dots) dt'$$

Annäherung:  $f(a(t'), b(t'), \dots) \simeq f(a(t), b(t), \dots)$ . Deshalb finden wir:

$$a(t + \Delta) = a(t) + f(a(t), b(t), \dots) \int_t^{t+\Delta} dt' = a(t) + \Delta f(a(t), b(t), \dots)$$

Intuitiv:  $f(a, b, \dots) = \dot{a} \simeq \frac{a(t+\Delta) - a(t)}{\Delta}$ .

## 7: Euler'sche Methode: iterative Lösung

Euler'sche Methode iterativ benutzen, um  $a(t)$ ,  $a(t + \Delta)$ ,  $a(t + 2\Delta)$ ,  $a(t + 3\Delta)$ , ... zu finden:

1.  $f_1(a(t_0), b(t_0), \dots)$ ,  $f_2(a(t_0), b(t_0), \dots)$ , ... rechnen
2.  $a(t_0 + \Delta)$ ,  $b(t_0 + \Delta)$ , ... davon rechnen
3. Zurück nach 1. aber  $a(t_0 + \Delta)$ , ... statt  $a(t_0)$  benutzen

Je kleiner  $\Delta$  und je mehr Schritte ich benutze, so genauer sind die Antworten:

Beispiel:  $\dot{a} = f(a) = a$ ,  $a(0) = 1$ .

Die exakte Lösung ist bekannt:

$$a(t) = \exp(t)$$

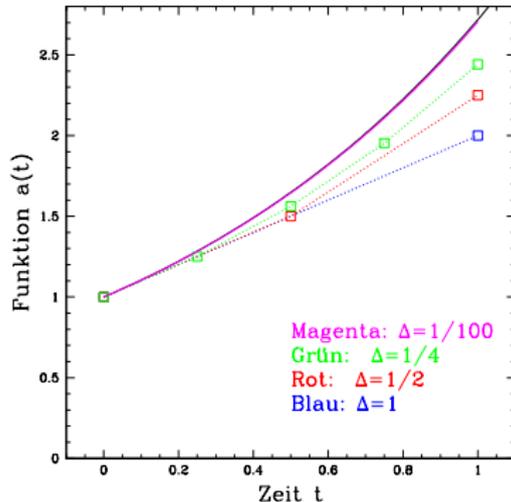
Euler'sche Methode findet:

$$\Delta = 1 \rightarrow a(1) = 2$$

$$\Delta = 1/2 \rightarrow a(1) = 2.25$$

$$\Delta = 1/4 \rightarrow a(1) = 2.4414 \dots$$

$$\Delta = 1/100 \rightarrow a(1) = 2.7048 \dots$$



## 8: Probleme und Bessere Methode

Die Euler'sche Methode ist nicht sehr genau. Grund dafür:

$$\int_{t_0}^{t_0+\Delta} f(a(t'), b(t'), \dots) dt' \simeq \Delta f(a(t_0), b(t_0), \dots)$$

annähert ein Integral mit dem Anfangswert.

Ein Integral an den Anfangswert anzunähern ist nicht sehr genau. Besser:

$$\int_{t_0}^{t_0+\Delta} f(a(t'), b(t'), \dots) dt' \simeq \Delta \frac{f(a(t_0), b(t_0), \dots) + f(a(t_0 + \Delta), b(t_0 + \Delta), \dots)}{2}$$

(die Trapezoidregel)

Ich kenne  $a(t_0 + \Delta)$  leider nicht - das wollte ich rechnen!

Aber ich kann es schätzen ...



### Runge Kutta II:

1.  $f_1(a(t_0), \dots), \dots$  rechnen
2. Diese Werte + **Euler'sche Methode** benutzen, um  $a_{\text{Euler}}(t_0 + \Delta) = a(t_0) + \Delta f_1(a(t_0), \dots)$  (und  $b, \dots$ ) zu schätzen
3.  $f_1(a_{\text{Euler}}(t_0 + \Delta), \dots), \dots$  rechnen
4. Durchschnitt  $(f_1(a(t_0), \dots) + f_1(a_{\text{Euler}}(t_0 + \Delta), \dots))/2$  benutzen:  
 $a(t + \Delta) = a(t) + \Delta(f_1(a(t_0), \dots) + f_1(a_{\text{Euler}}(t_0 + \Delta), \dots))/2$  (und das Gleiche für  $b, \dots$ )
5. Zurück auf 1. (iterativ)

Das heißt: Euler I benutzen, den Endwert zu schätzen.

Durchschnitt, Anfangs- und geschätzte Endwert benutzen.

## 10: Runge Kutta II Beispiel

Betrachten wir wieder  $\dot{a} = f(a) = a$ , mit  $a(0) = 1$ .

**Runge Kutta II** mit  $\Delta = 1$ :

$$f(a(0)) = 1$$

$$a_{\text{Euler}}(1) = a(0) + \Delta f(a(0)) = 2$$

$$f(a_{\text{Euler}}(1)) = 2$$

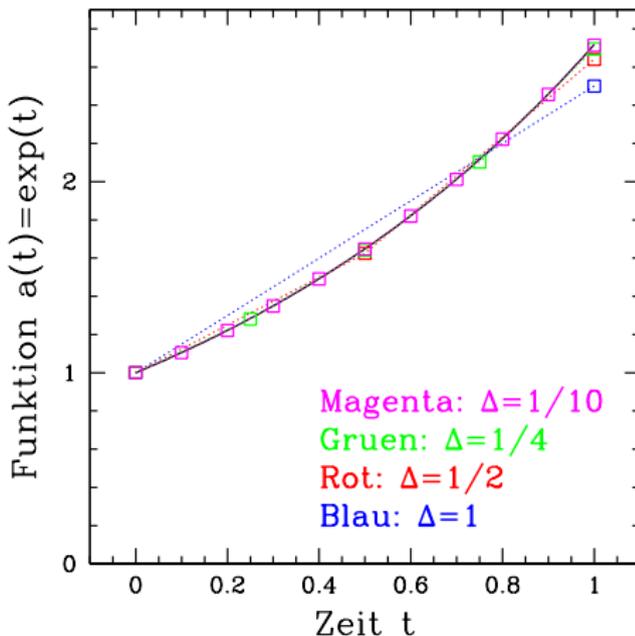
$$a(1) = a(0) + \frac{f(a(0)) + f(a_{\text{Euler}}(1))}{2}$$
$$= 1 + \frac{1+2}{2} = 2.5$$

2 Schritte:  $a(1) = 2.6506$

4 Schritte:  $a(1) = 2.6949$

10 Schritte:  $a(1) = 2.7141$

10 Schritte mit RKII ist besser als  
100 mit der Euler'sche Methode!



# 11: Noch bessere Methoden

Bei der Euler'sche Methode skalieren die Fehler als erste Potenz der Schrittweite.  
Bei RKII: zweite Potenz.

Bessere Methoden existieren. Z.B.: **Runge-Kutta IV** ist ugf. 2-mal komplizierter als RKII, aber die Fehler skalieren als vierte Potenz der Schrittweite.

(Wenn wir  $< 10^{-8}$  Fehler haben wollen, brauchen wir ugf. 100 Schritte bei RK IV, 10 000 bei RK II, und 100 000 000 bei Euler'sche.)

Es gibt weitere elegante Methoden – sehen Sie z.B.  
Press & Teukolsky “Numerical Recipes” Kapitel 17

## 12: Wie soll ich solche Probleme lösen?

Was wichtig ist, ist die Summe Ihrer Zeit und die Zeit des Rechners zu minimieren.  
Meine Empfehlung:

- ▶ Wenn Sie ein paar gDGI lösen wollen, ohne zu viel Arbeit:  
Softwaresysteme benutzen, z.B., Mathematica, oder MatLab, oder Python,  
oder ... (eine lernen und weiter benutzen)  
Python: <https://www.python-lernen.de/>
- ▶ Wenn sie ein System von  $10^6$  bis  $10^{11}$  gDGI lösen müssen, sollten Sie C oder C++ oder etwas ähnliches lernen, und eigene Codes schreiben.

## 13: Wie sehen die Lösungen aus?



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
DARMSTADT

Gehen wir zurück zu unserem Beispiel: der Doppelpendel.  
Am besten schauen wir ein Movie!

Diese Zeitentwicklung ist "chaotisch."  
Es gibt eine Theorie, "Chaostheorie," die Eigenschaften zu beschreiben und zu erklären.

Hier werden wir nur an der Oberfläche von Chaostheorie kratzen.

## 14: Schmetterlingseffekt

Die Zeitentwicklung hängt exponentiell von den Anfangsbedingungen ab. Gehen wir zurück auf unser Doppelpendel mit Faden. Betrachten Sie 2 Anfangsbedingungen:

$$(\theta_1(t_0), x_1(t_0), y_1(t_0), \dot{\theta}_1(t_0), \dot{x}_1(t_0), \dot{y}_1(t_0)) \quad \text{und} \quad (\theta_2(t_0), x_2(t_0), y_2(t_0), \dot{\theta}_2(t_0), \dot{x}_2(t_0), \dot{y}_2(t_0))$$

Ihre Zeitentwicklung ist  $(\theta_1(t), x_1(t), y_1(t))$  und  $(\theta_2(t), x_2(t), y_2(t))$ .

Wie unterschiedlich sind diese zwei Lösungen? Wir brauchen ein *metric*, z.B.,

$$\Delta \equiv (\ell^2(\theta_1 - \theta_2)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2) + \frac{m_1}{D} (\ell^2(\dot{\theta}_1 - \dot{\theta}_2)^2 + (\dot{x}_1 - \dot{x}_2)^2 + (\dot{y}_1 - \dot{y}_2)^2)$$

(die  $\ell$ ,  $m/D$  Faktoren sind dazu da, dass alle Einheiten gleich sind)

Wenn  $\Delta(t_0) \ll 1$  ist (die Anfangswerte nicht ganz genau gleich sind), nimmt  $\Delta(t)$  exponentiell zu!

$\Delta(t) \propto \exp(Yt)$ , wobei  $Y$  der **maximale Ljapunow-Exponent** ist.

**(Schmetterlingseffekt)**

## 15: Wann kann ein System kaotisch sein?

Betrachten Sie ein System mit  $3N$  Koordinaten, und:

- ▶  $k$  Zwangsbedingungen  $\Rightarrow 3N - k$  freie Koordinaten, braucht  $2(3N - k)$  Anfangsdaten (die  $q_i, \dot{q}_i$  für  $i = 1, \dots, 3N - k$ )
- ▶  $K$  Erhaltungsgröße, zB., Energie,  $\varphi$ -Drehimpuls, usw.

Wir brauchen  $2(3N - k)$  Werte, um das System komplett zu beschreiben.

Aber  $K$  davon bleiben danach immer gleich – nur  $2(3N - k) - K$  Werten ändern sich mit Zeit, oder das System bewegt sich durch eine  $2(3N - k) - K$ -dimensionale Mannigfaltigkeit von möglichen Werten.

Wenn  $K \geq (3N - k)$  ist, ist das System “integrabel” und kann nicht kaotisch sein.

Wenn  $K < (3N - k)$  ist (mehr Koordinaten als Erhaltungsgröße) kann das System kaotisch sein.

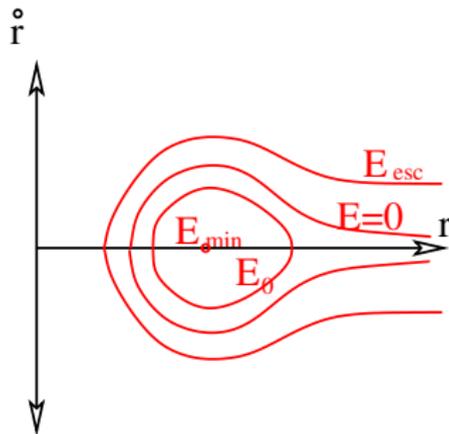
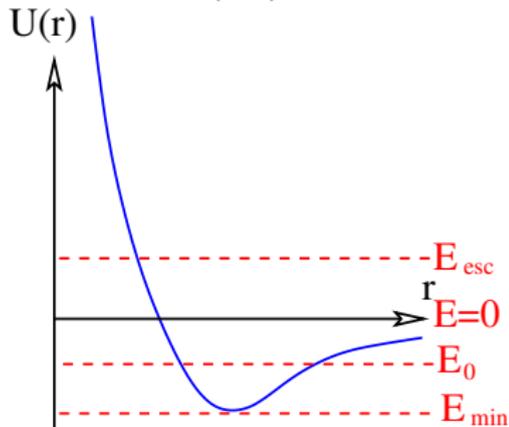
“Kann” – muss nicht. Aber *generisch* ist es kaotisch.

## 16: Warum eine $2N - K$ -dimensionale Oberfläche?

Warum bleibt ein System auf eine  $2(3N - k) - K$  dimensionale Mannigfaltigkeit?  
Um das einfacher zu sehen, betrachten wir nur  $r, \dot{r}$ :

$$L(r, \dot{r}) = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - U(r), \quad U(r) = \frac{p_\varphi^2}{2\mu r^2} - \frac{\alpha}{r}.$$

Betrachten Sie die  $(r, \dot{r})$ -Ebene. Wo ist  $H(r, \dot{r}) = T + U = E_0$ ?



Chaotische Systeme kommen *nie* zurück an ihren Anfangspunkt.  
Welche Werte passieren durch die Zeitentwicklung?

Für gegebene  $(\theta(t_0), x(t_0), y(t_0), \dot{\theta}(t_0), \dot{x}(t_0), \dot{y}(t_0))$  gibt es  $(\theta, x, y, \dot{\theta}, \dot{x}, \dot{y})$ -Werte, die nicht erreichbar sind – die einen anderen Energiewert haben. Die Energie  $E$  hat einen bestimmten Anfangswert, und dieser Wert muss immer gleich bleiben. Deshalb bleiben  $(\theta, x, y, \dot{\theta}, \dot{x}, \dot{y})$  auf einer 5-dimensionalen Oberfläche (Mannigfaltigkeit) in 6-dimensionalen “Phasenraum”.

(Im Allgemeinen haben  $N$  Koordinaten einen  $2N$ -dimensionalen Raum von  $(q, \dot{q})$ -Werten. Die erlaubte Oberfläche ist  $2N - K$  dimensional, wobei  $K$  die Zahl der Erhaltungsgrößen ist.)

**Ergodizität:** Im Laufe der Zeit erforscht das System alle Punkte auf dieser Oberfläche, in dem Sinne, dass es schließlich jedem Punkt willkürlich nahe kommt.

## 18: Summary in English

Generically, mechanics problems have more coordinates than conserved quantities. When this is the case, it is generally impossible to find solutions analytically.

We can find solutions numerically, by recasting our equations as a system of 1<sup>st</sup> order differential equations, and then using an algorithm such as:

- ▶ **Euler's method:** We take a series of discrete time steps, using the derivative at the initial point to forecast the end point.
- ▶ **Runge-Kutta II:** We use Euler's method to forecast the endpoint, evaluate the derivative at this projected endpoint, and average the initial and projected final derivatives
- ▶ **Runge-Kutta IV:** more intermediate estimated values...

The solutions have two interesting properties:

- ▶ Exponential sensitivity to initial data: **Butterfly effect**  
(positive largest **Lyapunov exponent**)
- ▶ **Ergodicity:** the coordinates and their derivatives wander densely over the space of values which have the same conserved numbers as the starting data.

**Frage:** Warum ist  $N_s = 0$  bei Schwerkraft?

Jedes Punkt hat Schwerkraft auf drauf. Jeder gibt ein  $N_s \neq 0$ .

$$\begin{aligned} \text{Die Summe } N_s &= \sum_{\alpha} \vec{r}_r \times \vec{F}_{\text{schwer}} = \sum_{\alpha} \vec{r}_r \times g m_{\alpha} \hat{e}_z \\ &= g \left( \sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{r}_r \right) \times \hat{e}_z = g(\mathbf{0}) \times \hat{e}_z = 0 \end{aligned}$$



**Frage:** Wenn  $I_1 = I_2$  sind  $\varphi, \psi$  beide zyklisch.  
Warum 3, nicht 2, Erhaltungsgröße?

**Antwort:**  $p_\varphi, p_\psi$ , und Energie  $H$ .