

ARBEITSKREIS BAYERISCHER PHYSIKDIDAKTIKER

BEITRAG AUS DER REIHE:

Werner B. Schneider (Hrsg.)

Wege in der Physikdidaktik

Band 2

Anregungen für Unterricht und Lehre

ISBN 3 - 7896 - 0100 - 4

Verlag Palm & Enke, Erlangen 1991

Anmerkung:

Die Bände 1 bis 5 sind (Ausnahme Band 5) im Buchhandel vergriffen.
Die einzelnen Beiträge stehen jedoch auf der Homepage

<http://www.solstice.de>

zum freien Herunterladen zur Verfügung.

Das Copyright liegt bei den Autoren und Herausgebern.

Zum privaten Gebrauch dürfen die Beiträge unter Angabe der Quelle
genutzt werden. Auf der Homepage

www.solstice.de

werden noch weitere Materialien zur Verfügung gestellt.

Simulationsprogramme in der Physikhochschulausbildung (Ziele, Beispiele, Erfahrungen, Sammlung)

1. Einleitung

Mitte der 80er Jahre setzte das Computerinvestitionsprogramm (CIP) von Bund und Ländern viele Fachbereiche in die Lage, Rechner in die Hochschulausbildung zu integrieren. Vielerorts entstanden Rechner-Pools; hardwaremäßig waren damit gute Bedingungen geschaffen. Woran es mangelte, waren die personelle Betreuung, das Vorhandensein von geeigneter Software usw. Hinzu kam, daß nicht alle Fachbereiche die Notwendigkeit eines besonderen finanziellen Engagements sahen. So konnten u.U. die CIP-Pools nicht voll ausgeschöpft werden.

Von August 1987 bis Juli 1989 gelang es uns, ein vom Bundesministerium für Bildung und Wissenschaft (BMBW) finanziertes "Projekt über den Einsatz von Personalcomputern in der Physikhochschulausbildung (PPP)" erfolgreich durchzuführen. Ziel dieses Projektes war die modellhafte Entwicklung von Teach Software, zunächst mit dem Schwerpunkt Simulationsprogramme, um die Möglichkeiten einer engeren Einbindung des Rechners in die Hochschulausbildung auszuloten.

Das Projekt lieferte wertvolle Produkte und Erfahrungen hinsichtlich Einsatz und Eignung, Entwicklung und Überarbeitung von Teach Software.

2. Programmbeispiele

2.1. Vorbemerkungen zur Programmerstellung

Seit 1985, seitdem also ein CIP-Pool zur Verfügung stand, wird in jedem Semester ein Seminar "Computerunterstützte Physik" abgehalten, in dem Kleingruppen projektartig ein physikalisches Problem am Rechner bearbeiten. Lernziele sind Einsicht in physikalische Fragestellungen, Kenntnis numerischer Methoden, Lernen einer Programmiersprache, Übersetzenkönnen eines physikalischen Problems in einen Lösungsalgorithmus. Aus diesem Seminar sind häufig interessante Fragestellungen und Ansätze in das BMBW-Projekt übernommen und professionell weiterentwickelt worden. Viele der in Abschnitt 3 aufgelisteten Programme besitzen eine solche Vorgeschichte.

Da viele Programmierabschnitte einen vom konkreten physikalischen Problem unabhängigen Charakter haben (z. B. Ein-/Ausgabe, Graphikroutinen, mathematische Prozeduren usw.), wäre es unsinnig, diese Teile von den Studenten und Studentinnen immer wieder neu schreiben zu lassen. So wurden im Rahmen des PPP Module als Entwicklungsumgebung erstellt, die im Seminar von den Gruppen benutzt werden können.

Insgesamt werden einige Anforderungen an die Software-Entwicklung gestellt:

- lauffähig auf den gängigen PC-Konfigurationen,
- benutzungsfreundlich, bedienbar auch für PC-Unerfahrene,
- physikalisch und numerisch sinnvolle Vorbelegung von wählbaren Größen,
- schriftliche Dokumentation mit Programmbeschreibung, Beispielen, Aufgaben, Literaturhinweisen usw.,
- interessantes Thema, einsichtige graphische Darstellung,
- vielseitige Anwendungsmöglichkeiten.

Durch die Benutzung der Hilfsmodule werden nebenbei Programmabschnitte in der Bedienung standardisiert. Die Liste der Anforderungen beschreibt die formalen Randbedingungen bei der Programmentwicklung. Ausgangspunkt ist in der Regel eine interessante Fragestellung. Didaktische Überlegungen setzen erst später ein.

Bisher konnten die Programme in folgenden Lehrveranstaltungen mit Erfolg eingesetzt werden:

- Demonstration in Experimentalphysik-Grundvorlesungen.
- In Verbindung mit Übungsaufgaben begleitend zu Kursvorlesungen in Theoretischer Physik (Streutheorie, Nichtlineare Dynamik).
- Rechnerverknüpfte Experimente und Auswertung von Meßdaten in Anfänger- und Fortgeschrittenenpraktikum (AP und FP) sowie im Laborpraktikum (LAB).

2.2. Beispiele

2.2.1. MEMBRAN: Simulation zweidimensionaler Schwingungssysteme

Das Programm simuliert gedämpfte Schwingungen einer ebenen Membran mit beliebiger Geometrie unter harmonischer Erregung:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + 2\rho \frac{\partial w}{\partial t} - \Delta w = F.$$

$w = w(\vec{r}, t)$ ist die Schwingungsamplitude als Funktion von Raum- und Zeitkoordinaten, $F = F(\vec{r}, t)$ eine harmonische Erregung, ρ ist ein Dämpfungsparameter, Δ ist der Laplace-Operator. Weil es nur für wenige spezielle Membrangeometrien (z. B. Rechteck, Kreis) analytische Lösungen gibt, muß das allgemeine Problem numerisch behandelt werden. Dazu wird die Membran in maximal $26 \times 26 = 676$ Gitterpunkten diskretisiert. Jeder dieser Gitterpunkte kann eine von vier möglichen Bewegungsformen annehmen: freischwingende Masse, feststehender Punkt, Loch oder unbeeinflußt schwingender Erreger. Belegungsart und Geometrie können in einem Editor konstruiert werden.

Insgesamt sind maximal 676 Differentialgleichungen zweiter Ordnung zu integrieren. Die Zeitentwicklung wird nach der Half Step Approximation durchgeführt, bekannt auch unter der Bezeichnung Second Order Taylor Approximation.

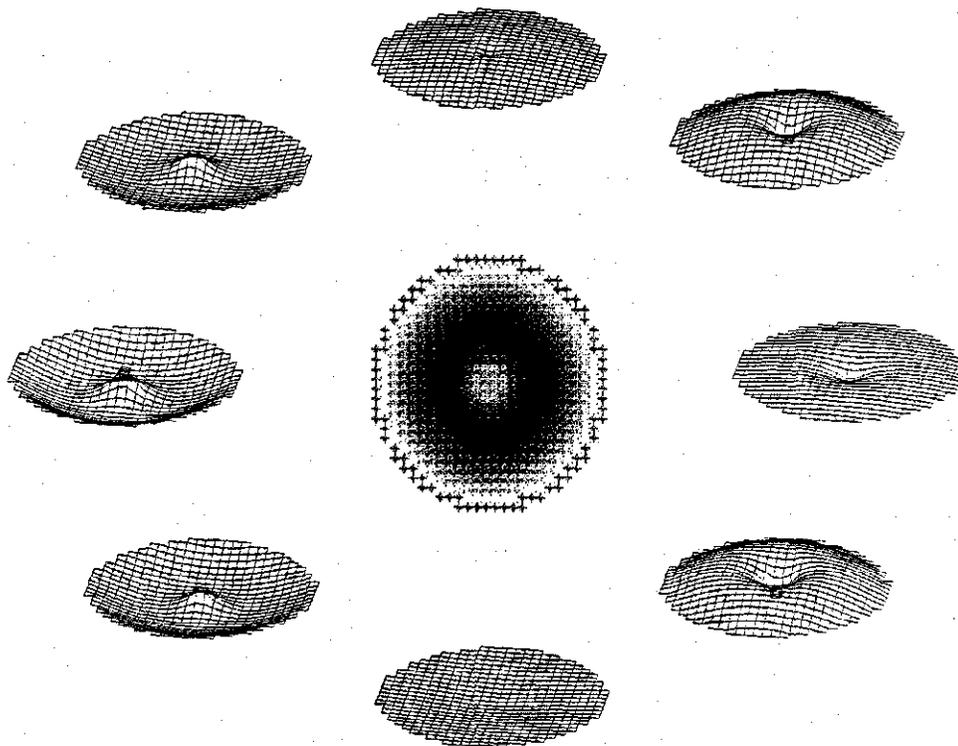


Abb. 1: Grundmode einer im Zentrum erregten Kreismembran in Punktdichte – und Filmdarstellung (hier ein Auszug aus den Einzelbildern des Films).

Die Darstellung der schwingenden Membran kann auf zwei Weisen erfolgen. Erstens ist es möglich, die Membran in Aufsicht zu sehen (Abb. 1 Mitte), wobei die Punktdichte ein Maß für die Auslenkung ist. Nach jeder Periode T werden die neue Punktdichte, aktuelle Membrandidaten (mittleres Amplitudenquadrat, verstrichene Zeit) und weitere Parameter, wie Erregerfrequenz, Masse, Kopplung zwischen den Massen usw., ausgegeben. Zweitens kann die Membran in einem Film (in Schrägsicht) dargestellt werden (Abb. 1 äußerer Ring von Einzelbildern).

Man kann auf diese Art und Weise das Einschwingverhalten, die Anregung verschiedener Moden bei verschiedenen Geometrien und Schwingungsparametern usw. untersuchen.

Daneben erlaubt das Programm auch die Aufnahme einer Resonanzkurve. Ein Beispiel zeigt Abb. 2, wo nachträglich der Typ der Mode und die zugehörige Frequenz für den Fall der im Zentrum erregten Kreismembran von Abb. 1 eingetragen wurden. Die Abb. 2 zeigt ein physikalisch interessantes Phänomen: Die m_0 -Moden werden mit steigender Erregerfrequenz schwächer angeregt, während die m_1 -Moden ein entgegengesetztes Verhalten zeigen.

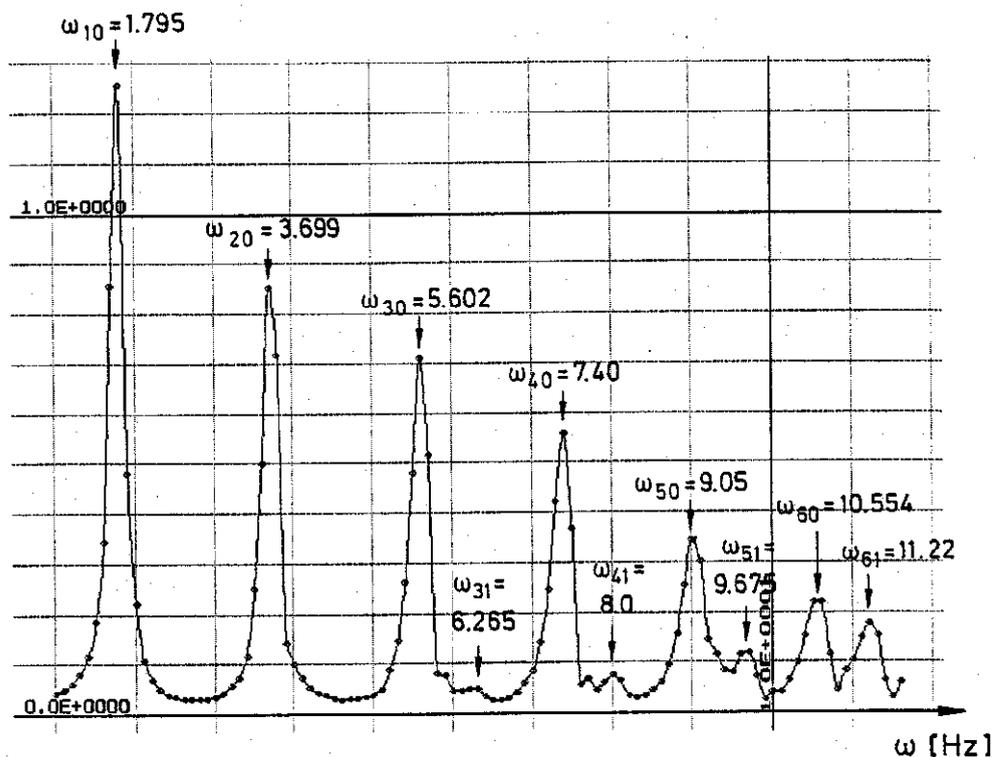


Abb. 2: Resonanzkurve einer im Zentrum erregten Kreismembran.

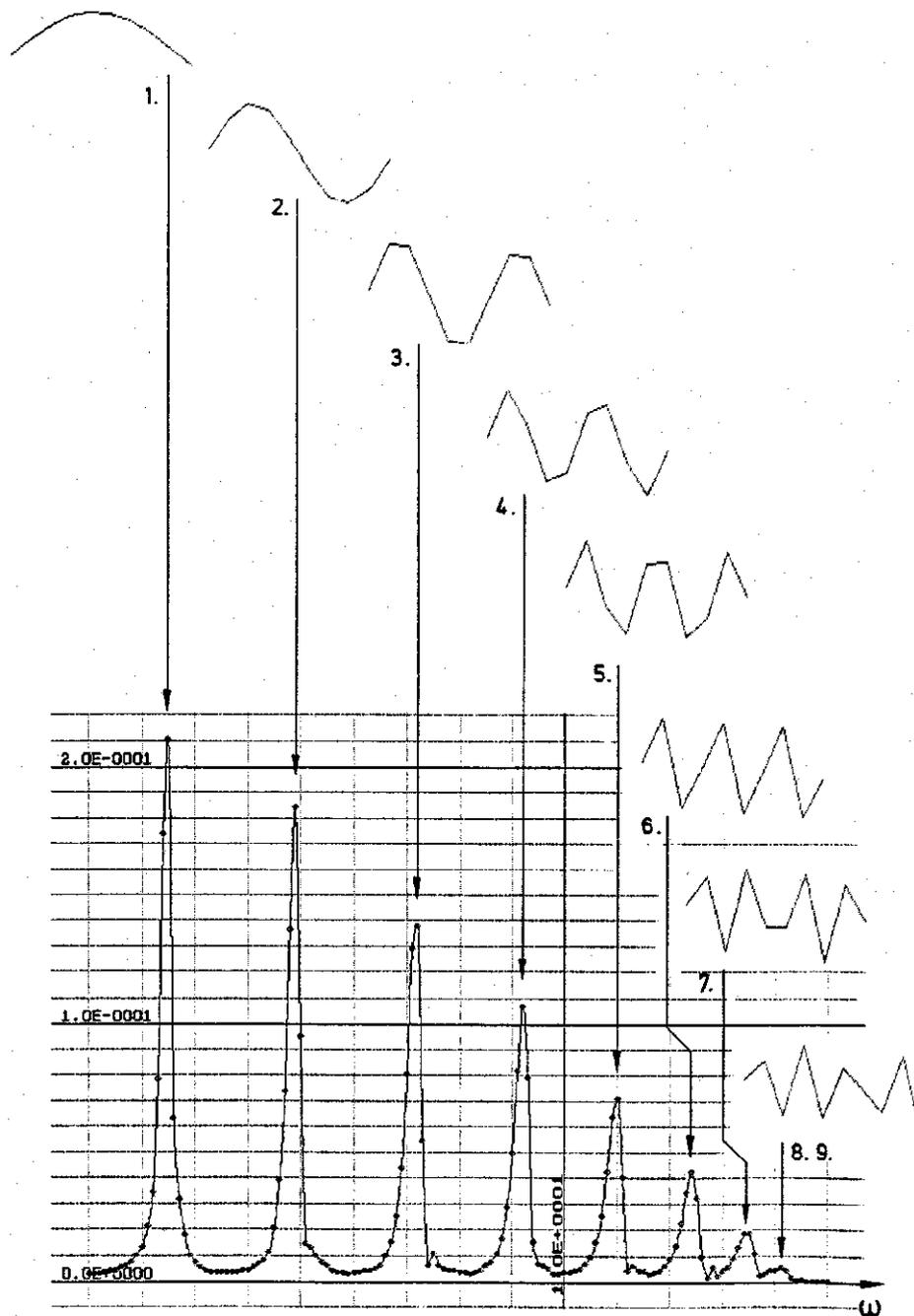


Abb. 3: Resonanzkurve einer "Perlenkette", die am linken Ende befestigt ist und am rechten erregt wird. Die Moden 8 und 9 liegen eng beieinander, weshalb sie hier kaum aufgelöst sind.

Bei der Diskretisierung tritt gegenüber der realen Membran das Problem der Dispersion auf: Es gibt eine höchste Frequenz, bei der die Massen gegenphasig zueinander schwingen (Zick-Zack- oder Schachbrett-Schwingung). Dies wird deutlich, wenn man die "Perlenkette" (\sim Seil) als eindimensionalen Grenzfall des Punktgitters (\sim Membran) betrachtet. Anstatt unendlich vieler Moden hat man es hier nur mit neun zu tun (Abb. 3).

Zusammenfassend kann das Konzept des Programmes im Hinblick auf Einsatzmöglichkeiten, wie z. B. Miniforschung verdeutlicht werden: Das Programm gestattet es, Geometrien frei zu wählen und Parameter der Bewegung, wie loses oder festes Ende, punktuelle Erreger oder Gesamtanregung, Erregerfrequenz, Dämpfung, Kopplung der Massen, zu variieren. Damit können die unterschiedlichsten Fragestellungen von den Lernenden selbständig bearbeitet werden.

2.2.2. H-ATOM: Simulation von Wasserstoffwellenfunktionen

Das Wasserstoffatom ist ein einfaches Beispiel für die analytische Lösbarkeit der Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi = E\Psi$$

mit dem Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V,$$

wobei V das Coulomb-Zentralpotential

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

darstellt. Die Lösung in sphärischen Koordinaten erfolgt über Separation der Variablen; man vergleiche entsprechende Lehrbücher:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Für die Quantenzahlen n, l, m , gilt:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m = -l, \dots, 0, \dots, l.$$

Mit der Wellen- bzw. Zustandsfunktion Ψ_{nlm} wird genau ein Zustand beschrieben (bei Vernachlässigung des Elektronenspins).

Die Größe

$$|\Psi_{nlm}|^2 = \Psi_{nlm}^* \Psi_{nlm}$$

beschreibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons bzw. seine Wahrscheinlichkeitsdichte im gegebenen Zustand. Vereinfacht lässt sich die Bedeutung der Quantenzahlen wie folgt physikalisch anschaulich vorstellen: die Hauptquantenzahl n bestimmt die Ausdehnung des Atoms, die Drehimpulsquantenzahl l seine Form, während die magnetische Quantenzahl m seine räumliche Orientierung angibt.

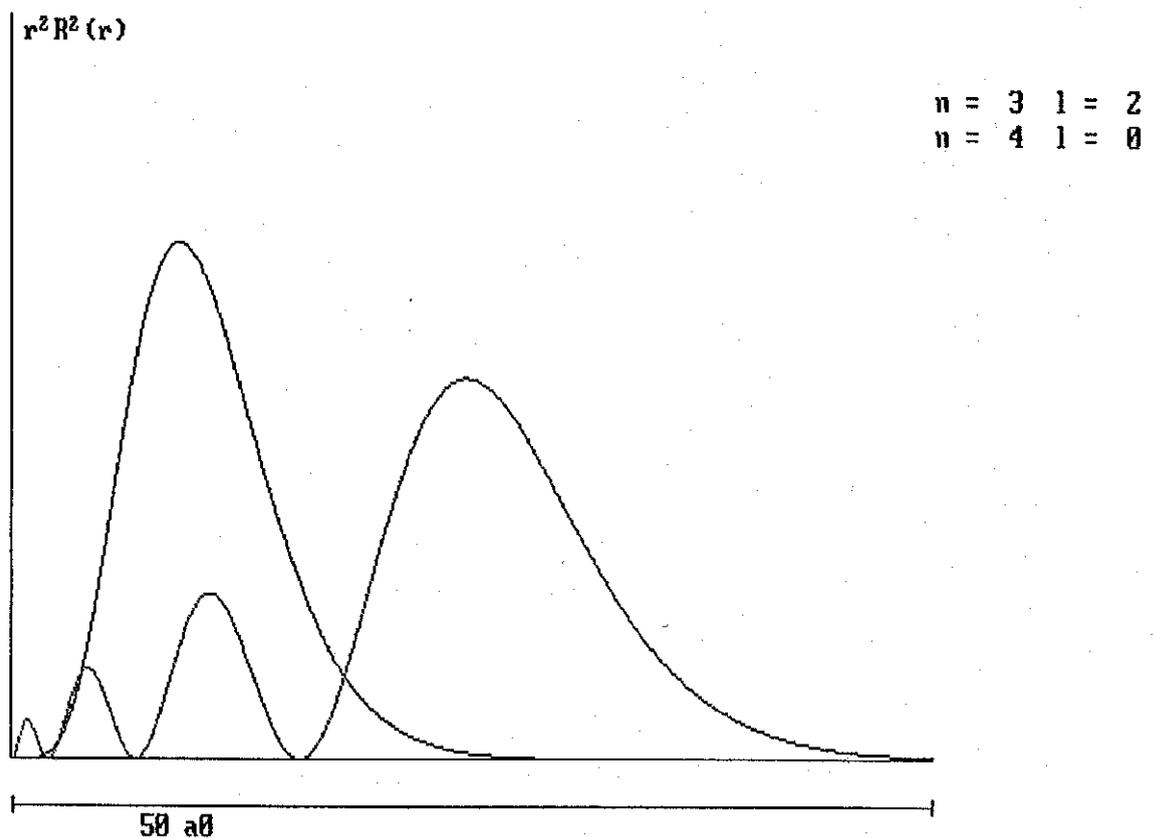
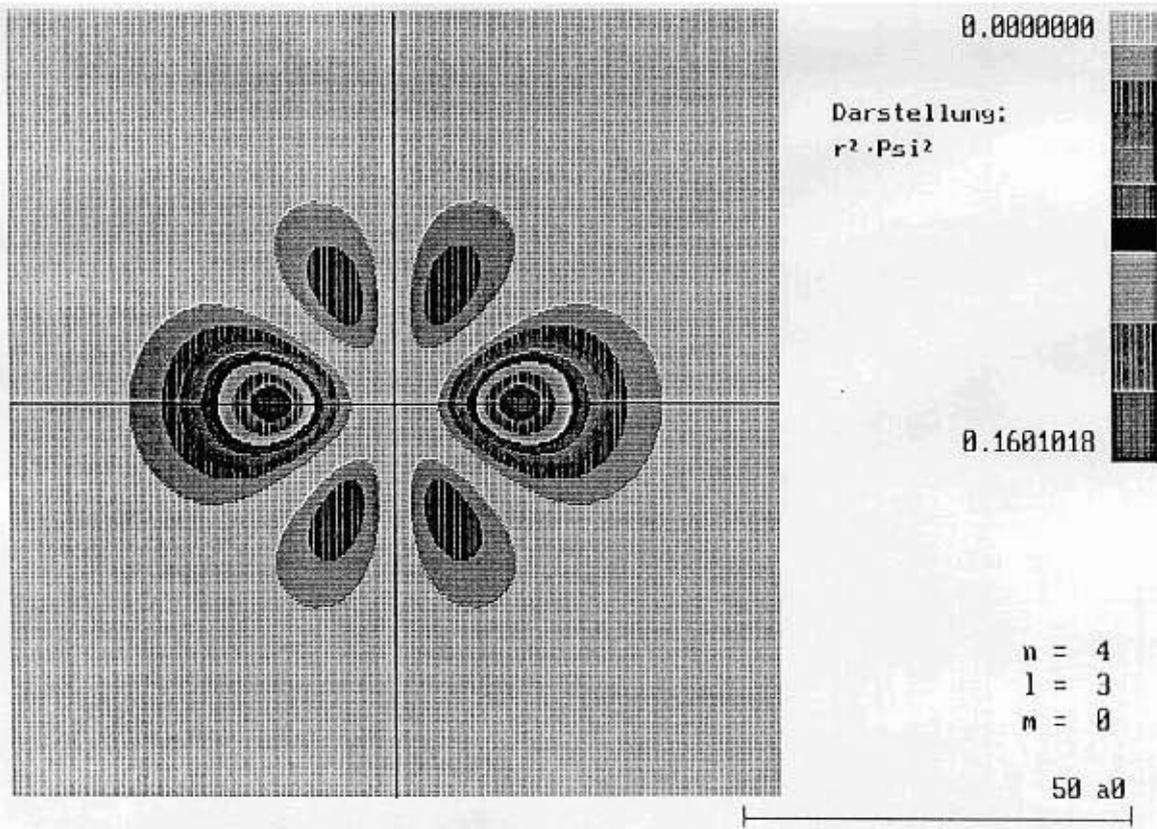


Abb. 4: Radiale Dichtefunktion für den 3d- sowie den 4s-Zustand. Der tief eindringende Teil der 4s-Wellenfunktion liefert die Erklärung für die Aufhebung der l -Entartung.



Wasserstoffwellenfunktion

Wertebereich: 0.000000 - 0.1601010
 $n = 4$ $l = 3$ $m = 0$ $r = 50.0 a_0$

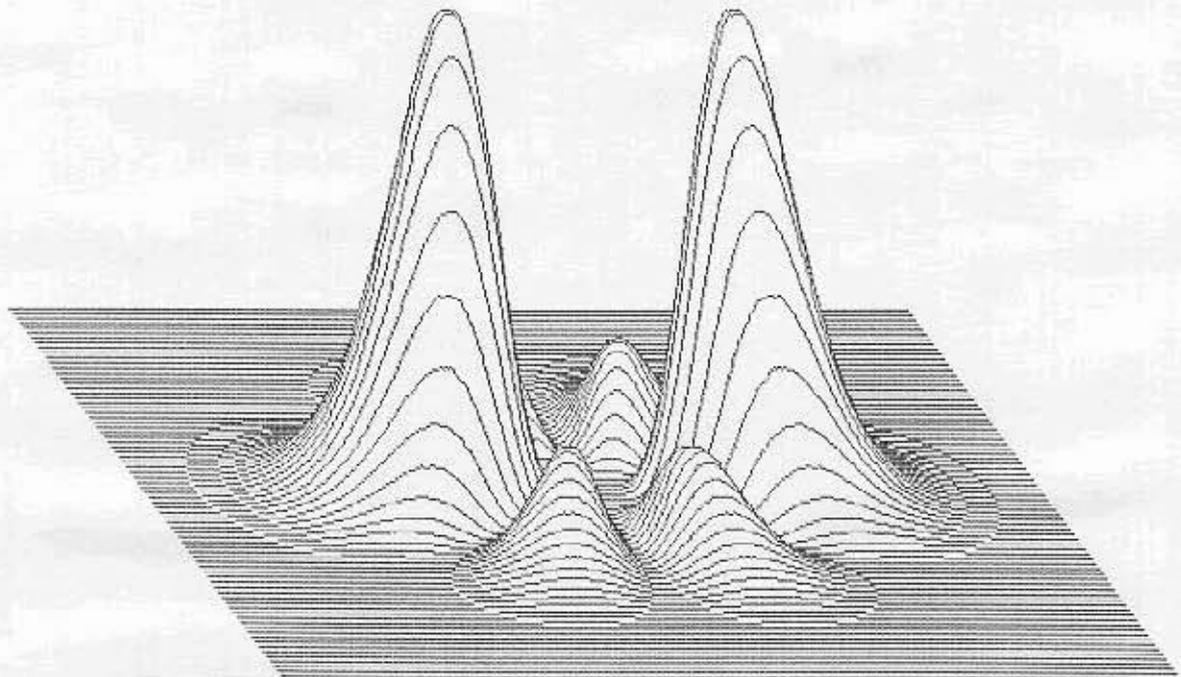


Abb. 5: Die mit r^2 gewichtete Zustandsdichte in zwei Darstellungsweisen, als Bildschirmhardcopy. Die Graustufendarstellung im oberen Bild ist in der Realität farbig.

Das Programm vermag die Größen Ψ , Ψ^2 und die Gewichtsfunktion $r^2\Psi^2$ sowie auch die radiale Dichtefunktion r^2R^2 für beliebige Quantenzahlkombinationen darzustellen. Da r^2R^2 rotations-symmetrisch ist, wird lediglich der Funktionsverlauf über r (in Einheiten des Bohrschen Radius a_0) aufgetragen. Hier lassen sich die Phänomene "Tauchbahn" und Kreisbahn diskutieren, ebenso die Aufhebung der l-Entartung bei Alkali-Atomen, auch das Problem des Begriffes Radius, wenn sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für einen größeren Raumbereich erstreckt.

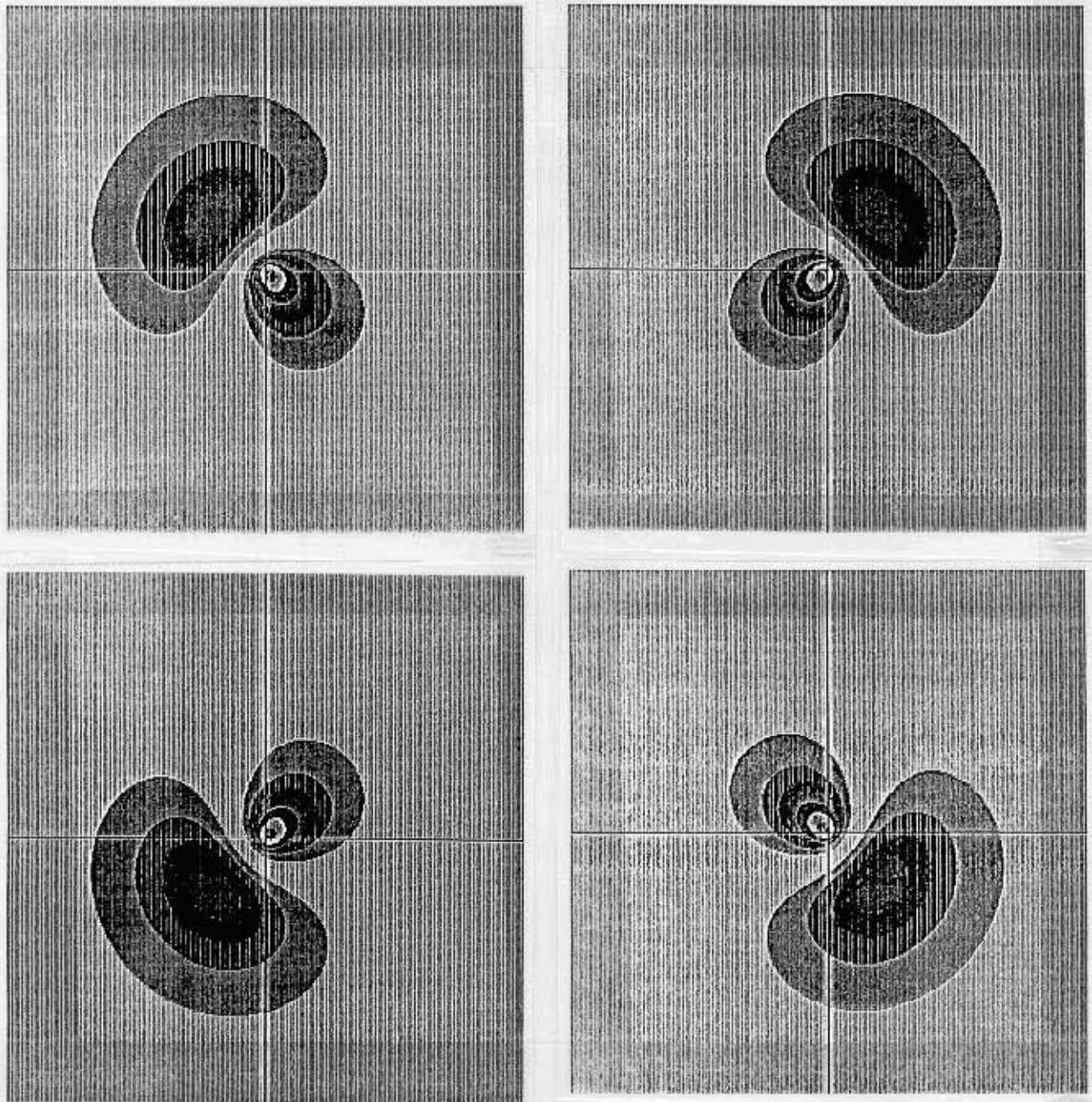


Abb. 6 Ein-Zentren-Hybridwellenfunktionen als Modell für die molekülbildenden Orbitale des CH_4 -Tetraeders. Die Graustufencodierung und die Angabe der Linearkombination wurden hier aus drucktechnischen Gründen fortgelassen (man vgl. Abb. 5).

Die Darstellung von Ψ , Ψ^2 bzw. $r^2\Psi^2$ bringt Probleme mit sich, weil diese Funktionen von drei Raumkoordinaten abhängen. Zu ihrer exakten Darstellung gehören demnach vier Größen: drei Raumkoordinaten (x, y, z oder r, θ, φ) und Funktionswert. Da dies i.a. nicht möglich ist, muß man Beschränkungen hinnehmen. So wird die Wellenfunktion hier in der yz -Ebene geschnitten. Der Funktionswert kann nun a) in Form eines farbigen Höhenliniendiagrammes oder b) perspektivisch als Gebirge eingezeichnet werden (Abb. 5).

Anhand dieser Darstellungsweisen können verschiedene Betrachtungen angestellt werden: Diskussion der Knoten, Symmetrieuntersuchungen usw.

Eine Linearkombination der Wellenfunktion aus vier Lösungen erlaubt die Simulation der sich aus dem Stark-Effekt ergebenden Orbitale und die Simulation von Hybridwellenfunktionen im Zusammenhang mit dem Molekülbau. Abb. 6 zeigt die vier sp^3 -Hybride des Wasserstoffatoms, wie sie als Modell für die Orbitale des CH_4 (Molekülsymmetrie C_{3v}) dienen können.

Auch an diesen Fragestellungen wird sichtbar, daß der Programmeinsatz im Hinblick auf Mini-forschung sinnvoll sein kann.

3. Programmsammlung

Im folgenden werden die bisher erstellten Programme aufgelistet. Aus Platzgründen muß auf eine Kurzbeschreibung verzichtet werden. Auf Wunsch kann dies zugesandt werden. Die Programme werden gegen einen geringen Unkostenbeitrag inklusive Diskette und Dokumentation von den Autoren weitergegeben (Liste und Preise anfordern).

BANDSTRUKTUR
BILLARDS
CHAOS-GENERATOR
CHAOS IM FEIGENBAUM-SZENARIO
DOPPELPENDEL
DREI-KUGEL-STREUUNG
DUFFING-OSZILLATOR
FERMI-BESCHLEUNIGUNG
ELEKTROSTATISCHE FELDER
H-ATOM
ISING-MODELL
KEIL
KLASSISCHE POTENTIALSTREUUNG
KOLLINEARE STOSSPROZESSE
LINEARE OPTIK

JULIA MANDELBROT
MEMBRAN-SCHWINGUNGEN
MILNE-QUANTISIERUNG
NICHTLINEARE KETTE
N-KÖRPER-PROBLEM
ODE (ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS)
PERCOLATION
PERIODISCHE POTENTIALE
PIA (PARTICLE INTERACTION ALGORITHMUS)
QUANTENMECHANISCHE POTENTIALSTREUUNG
SEMIKLASSISCHE POTENTIALSTREUUNG
SPRINGENDER BALL
STREUUNG AN EINER ELLIPSE
WELLENPAKETE
WKB-QUANTISIERUNG

4. Schlußbetrachtungen und Ausblick

Anhand der beiden Beispiele sollte deutlich geworden sein, daß wesentliche physikalische Begriffe und Inhalte (hier also Grundbegriffe der Schwingungs- und Wellenlehre, elementare Quantenmechanik des Wasserstoffatoms) vermittelt werden können. Der Einsatzbereich ist breit: im durch Aufgaben angeleiteten Selbststudium, als begleitende Übung einer Spezialvorlesung oder als Demonstration in einer Vorlesung. Zwischen dem, was ein Programm an Möglichkeiten bieten kann (innerhalb eines vertretbaren Aufwandes) und dem, was physikalisch und didaktisch sinnvoll ist, kann durchaus ein enger Zusammenhang hergestellt werden.

Die Hauptziele, die wir mit der teachware neben den verschiedenen Einsatzmöglichkeiten in der Lehre verfolgen, sind:

- Visualisieren von komplexen Zusammenhängen (z. B. Wellenfunktion),
- Erschließung neuer Sachgebiete, wie z. B. Chaos und Fraktale,
- exercise in research oder sog. Miniforschung durch Lernende.

Da der Schwerpunkt Simulationsprogramme nur einen Teil des Rechnereinsatzes ausmacht, werden wir uns in einem Folgeprojekt PPPP (1991 – 1994) verstärkt der Rechner-Experiment-Verknüpfung zuwenden. Dieser Bereich ist gerade für eine experimentelle Wissenschaft essentiell, auch in Bezug auf Ausbildung und Berufsbild. Erste Erfahrungen zeigen, daß die Erstellung solcher teachware sehr viel zeit- und personalintensiver ist als die Erstellung von Simulationsprogrammen. Neben der reinen Programmierung kommen die experimentell-technischen und hardwaremäßigen Probleme hinzu. Bisher läßt sich feststellen, daß neue Möglichkeiten für die Praktika erschlossen werden können und daß eine Hinterfragung vieler traditioneller Praktikumlernziele notwendig sein wird.

5. Literatur

- [1] H. J. Korsch, B. Mirbach und H.-J. Jodl
Praxis der Naturwiss. (1987) S. 2
Chaos und Determinismus in der klassischen Dynamik: Modellstudium für Billards
- [2] H.-J. Jodl
Wege in der Physikdidaktik, Hrsg. W. B. Schneider, Verlag Palm und Enke, Erlangen, 1989
Computer im Physikunterricht (Schule, Hochschule) – Stand, Möglichkeiten und Grenzen
- [3] F. Speckert, H. J. Korsch und H.-J. Jodl
DPG FA Didaktik der Physik, Hrsg. W. Kuhn, Frühjahrstagung, Berlin 1987
Quantenmechanik auf dem Rechner: Dynamik von Wellenpaketen

-
- [4] H.-J. Jodl
Int. Workshop on Teaching Nonlinear Phenomena, Balaton, Hungary, Mai 1987
Workshop report: Chaos on microcomputer
- [5] A. Grammel, M. Rubly, H. J. Korsch, H.-J. Jodl
Physik und Didaktik 1 (1988) S. 35
Physikalische Simulation auf dem Rechner – Wasserstoffwellenfunktion
- [6] J. Becker, F. Speckert, H. J. Korsch, H.-J. Jodl
Physik und Didaktik 2 (1988) S. 127
Simulation der Dynamik von Wellenpaketen
-
- [7] J. Depireux, H. Jodl and J. Wilson
Proceedings of the Int. Conf. on Teaching of Modern Physics, Universität München,
12. – 16. Sept. 1988
Hrsg. K. Luchner, Verlag World Scientific 1989
Report on Workshop 3 – Software, Audiovisuals
- [8] J. Becker, M. Rubly, A. Grammel, H.-J. Jodl
Physik und Didaktik 1 (1989) S. 65
EXSYS: Ein universelles computergestütztes Experimentiersystem
- [9] B. Eckert, H. J. Korsch und H.-J. Jodl
Physik und Didaktik 3(1989) S. 191
Membran – Ein Simulationsprogramm zweidimensionaler Schwingungssysteme
- [10] H. J. Korsch und H.-J. Jodl
Proceedings des CIP-Status Kongresses Berlin Okt. 1989, erscheint in Mikrocomputer-Forum für Bildung und Wissenschaften 2, Hrsg. K. Dette
Entwicklung von Teach-Software für die Physikhochschulausbildung
- [11] B. Eckert, H.-J. Jodl, H. J. Korsch, A. Grammel
Physik und Didaktik 4, (1990), S. 259
H-Atom – Ein Simulationsprogramm für Wasserstoffwellenfunktionen
- [12] J. Becker, A. Färbert und H.-J. Jodl
Physik und Didaktik 2, (1990), S. 163
CCD-Sensoren im physikalischen Praktikum
- [13] B. Eckert, H.-J. Jodl, H. J. Korsch
Proceedings des CIP-Status Kongresses Berlin Okt. 1990, erscheint in: Mikrocomputer Forum für Bildung und Wissenschaften 3, K. Dette (Hrsg.)
Stand und Probleme der PC-Implementierung in Hochschulpraktika
- [14] H.-J. Jodl, K. Luchner
Phys. Blätter (1991) eingereicht
Forschendes Lehren mit dem Computer