
Vorwort

Im vorliegenden Lehrbuch erfolgt eine Einführung in die Grundlagen der Simulation mit Hilfe von Beispielen. Dabei wird auf die wichtigsten Aspekte bei der Anwendung von Simulationsverfahren hingewiesen - nämlich die Genauigkeit sowie Stabilität der numerischen Lösung, die Sensitivitätsanalyse und die Validierung der Simulationsmodelle.

Das Kapitel 2 befasst sich mit der Simulation zeitkontinuierlicher Systeme, das Kapitel 3 mit zeitdiskreten Systemen. Bei zeitdiskreten Modellen unterscheidet man zwischen zeitorientierten Systemen (siehe Kapitel 3.1) und ereignisorientierten (siehe Kapitel 3.2 und 3.3). Die numerische Lösung eines zeitkontinuierlichen Systems führt auf ein zeitorientiertes System.

Auf den Einsatz von Simulationssprachen wie z.B. ACSL (Advanced Continuous Simulation Language), CSMP (Continuous System Modelling Language), Matlab Simulink oder GPSS (General Purpose System Simulator) wird verzichtet. In diesem Buch stehen die Grundlagen der Simulation im Vordergrund. Simulationssprachen sind besonders für den Einsatz in der Praxis geeignet, da sie im Gegensatz zu allgemeinen Programmiersprachen (wie z.B. Fortran, Pascal, C oder Java) Sprachelemente zur direkten Formulierung der Modellgleichungen, z.B. von gewöhnlichen Differentialgleichungen, enthalten. Dadurch lässt sich der Zeitaufwand für die Lösung eines Problems erheblich reduzieren. Allerdings bleiben dem Anwender die Details der numerischen Lösung weitgehend verborgen. Im Kapitel 6.2 ist ein Beispiel mit der Simulationssprache CSMP dargestellt.

Die im Kapitel 2 verwendeten Modellgleichungen beziehen sich auf gewöhnliche Differentialgleichungen (d.h. eine unabhängige Veränderliche) bzw. auf partielle Differentialgleichungen (mit zwei unabhängigen Veränderlichen). Zum besseren Verständnis werden die meisten Modellgleichungen abgeleitet.

Die numerische Lösung der zeitkontinuierlichen Modellgleichungen wird im Detail dargestellt, wobei die gängigen Standardverfahren zur Anwendung kommen, nämlich das Euler-Verfahren, das Verfahren der Zentralen Differenzen und die Runge-Kutta-Methode. Auf den Einsatz von Finite Element Methoden zur numerischen Lösung der partiellen Differentialgleichungen wird verzichtet (eine Einführung in die Methode findet sich z.B. in der Referenz [MUNZ]). Eine Einführung in die Simulation, die zur Modellentwicklung insbesondere Blockschaltbilder verwendet, findet sich in der Referenz [NOLLAU].

Im Kapitel 6.1 erfolgt ein Hinweis auf die Problematik der Rundungsfehler. Die im Buch verwendeten Programmierbausteine erleichtern dem Leser die Umsetzung des Simulationsmodells in ein Programm. Für die Multiplikation wird im Text das Zeichen '*' verwendet, für das Komma in Zahlendarstellungen der Dezimalpunkt. Bei den Einheiten der physikalischen Größen Wärmeleitfähigkeit in $\text{W}/(\text{m}^*\text{K})$, spezifische Wärme in $\text{J}/(\text{kg}^*\text{K})$ und Wärmeübergangszahl bzw. Wärmedurchgangszahl in $\text{W}/(\text{m}^2*\text{K})$ wird zum besseren Verständnis K (Grad Kelvin) durch °C (Grad Celsius) ersetzt. Alle Bilder, Tabellen und Programmierbausteine werden in den Kapiteln 8 bis 10 zusammengefasst.

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	1
2 Simulation zeitkontinuierlicher Systeme	8
2.1 Der radioaktive Zerfall	8
2.2 Numerische Lösungsverfahren	17
2.3 Einbeziehung der Iteration	23
2.4 Die Sensitivitätsanalyse	29
2.5 Eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung ..	32
2.6 Das SIR-Modell	39
2.7 Die Füllstandsregelung	45
2.8 Die Wärmeleitungsgleichung	59
2.9 Die Wärmeleitung in einer Wand mit Isolierung	74
2.10 Das Sonderproblem Wärmeleitung mit Luftspalt ..	84
2.11 Die Diffusionsgleichung	91
3 Simulation zeitdiskreter Systeme	100
3.1 Die Simulation eines Lagers	100
3.2 Der Postschalter	118
3.3 Die ampelgesteuerte Kreuzung	138
4 Übungsaufgaben	148
5 Lösung der Übungsaufgaben	162
6 Anhang	180
Anhang 6.1 Rundungsfehler	180
Anhang 6.2 CSMP-Beispiel	182
Anhang 6.3 Schätzwerte beim Runge-Kutta-Verfahren ..	183
Anhang 6.4 Newton-Verfahren	184
Anhang 6.5 Typen partieller Differentialgleichungen ..	185
Anhang 6.6 Pseudozufallszahlen	186
Anhang 6.7 Beispielprogramm	188

7 Literaturverzeichnis	192
8 Verzeichnis der Bilder	195
9 Verzeichnis der Tabellen	198
10 Verzeichnis der Programmierbausteine	199
11 Stichwortverzeichnis	200

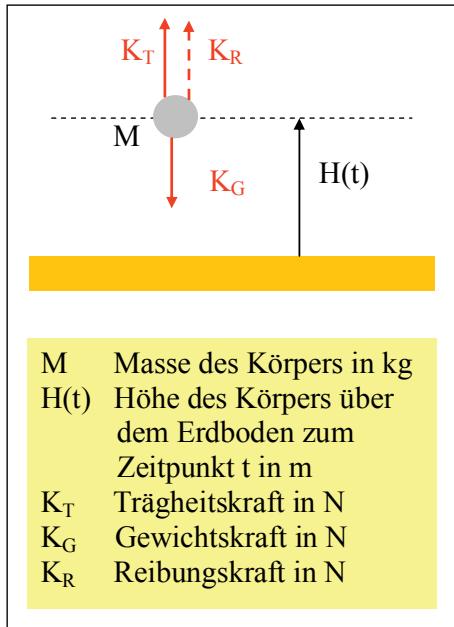
1 Einführung

Die Simulation auf dem Computer hat sich heute in vielen Bereichen zu einer unverzichtbaren Schlüsseltechnologie entwickelt. Insbesondere lassen sich durch Simulationsverfahren die Kosten und die erforderliche Zeit bei der Entwicklung neuer Produkte erheblich reduzieren. Die Planungssicherheit wird bereits in einem frühen Projektstadium erhöht.

Darüber hinaus lassen sich viele komplexe Prozesse mit Hilfe der Simulation in optimaler Weise untersuchen. Einige Beispiele: Flugsimulatoren, Wettervorhersagen, die Ausbreitung von Schadstoffen in der Grundwasserströmung, die Optimierung der Verbrennungsvorgänge in Motoren, die Crash-Simulation im Automobilbau, Hochwasservorhersagen, die Optimierung der Lagerprozesse in einem Hochregallager, die Untersuchung von Störfällen in chemischen Anlagen oder Atomkraftwerken und von strömungstechnischen Problemen im Flugzeugbau.

Die Simulationsverfahren bilden reale Prozesse auf dem Computer ab, wobei im ersten Schritt ein Modell des Prozesses erstellt wird. In der Regel sind die Modellgleichungen Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen oder partielle Differentialgleichungen, die numerisch gelöst werden. Analytische Lösungen der Modellgleichungen sind nur in Einzelfällen möglich. Modelle, die von vornherein zeitdiskret sind (siehe das Kapitel 3), werden als zeitdiskrete Systeme bezeichnet.

Zur Durchführung der Simulation wird das Modell auf einem Rechner in Form eines Programms implementiert. Die Rechnungen mit dem Programm stellen die Simulation im engeren Sinn dar. Der Vergleich der Ergebnisse mit dem realen Prozess entscheidet über die Qualität des Modells. Dabei ist die Kenntnis der möglichen Fehlerquellen, wie z.B. die Genauigkeit der numerischen Lösung oder der Einfluss der Sensitivitätsanalyse, von besonderer Bedeutung. Am Beispiel des freien Falls eines Körpers aus vorgegebener Höhe werden zunächst die Schritte Modellbildung und numerische Lösung erläutert.



Ein Körper der Masse M fällt aus der Höhe $H(0)$ im freien Fall nach unten. Die Startgeschwindigkeit ist $V(0) = 0.0$ m/s. Mit dem Modell soll der zeitliche Verlauf der Höhe $H(t)$ des Körpers und dessen Geschwindigkeit $V(t)$ ermittelt werden. Dabei wird zunächst der Einfluss der Luftreibung vernachlässigt. Die maßgeblichen, auf den Körper wirkenden Kräfte sind die Trägheitskraft K_T und die Gewichtskraft K_G . Bei Berücksichtigung der Luftreibung kommt noch die Reibungskraft K_R hinzu.

Bild 1.1 Der freie Fall

Aufstellung der Modellgleichungen

Es gilt die Kräftebilanz, d.h. *Summe der Kräfte = Null* bzw.

$$K_T + K_G = 0 \quad \text{oder}$$

$$M * \frac{dV(t)}{dt} + M * g = 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{dV(t)}{dt} = -g, \quad \text{AB } V(0) \quad (1.1)$$

$\frac{dV(t)}{dt}$ Beschleunigung des Körpers zum Zeitpunkt t in m/s^2

$V(t)$ Geschwindigkeit des Körpers zum Zeitpunkt t in m/s

g Erdbeschleunigung = $9.81 m/s^2$

AB Anfangsbedingung der Differentialgleichung

Außerdem gilt die Beziehung

$$\frac{dH(t)}{dt} = V(t), \quad AB \quad H(0) \quad (1.2)$$

Analytische Lösung

Die Gln. (1.1) und (1.2) sind in diesem speziellen Fall analytisch lösbar, d.h. die numerische Lösung entfällt. Aus der Gl. (1.1) folgt durch Integration

$$\int_0^t \frac{dV(\tau)}{d\tau} d\tau = -g * \int_0^t d\tau \quad \text{oder} \quad V(t) - V(0) = -g * t$$

und mit $V(0) = 0.0 \text{ m/s}$

$$V(t) = -g * t \quad (1.3)$$

Durch Einsetzen der Gl. (1.3) in Gl. (1.2) folgt

$$\frac{dH(t)}{dt} = -g * t \quad \text{bzw. nach Integration}$$

$$H(t) = H(0) - \frac{1}{2} * g * t^2 \quad (1.4)$$

Die Fallzeit T_F des Körpers, d.h. die Zeit bis zum Erreichen der Erdoberfläche, kann aus der Gl. (1.4) bestimmt werden.

$$H(T_F) = 0 \text{ m} = H(0) - \frac{1}{2} * g * T_F^2 \quad \text{bzw.} \quad T_F = \sqrt{\frac{2 * H(0)}{g}} \quad (1.5)$$

Das Bild 1.2 zeigt den Verlauf von $H(t)$ und $V(t)$ mit folgenden Modellparametern: $H(0) = 100 \text{ m}$, $V(0) = 0.0 \text{ m/s}$ und $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ bei einer Fallzeit von $T_F = 4.5 \text{ s}$.

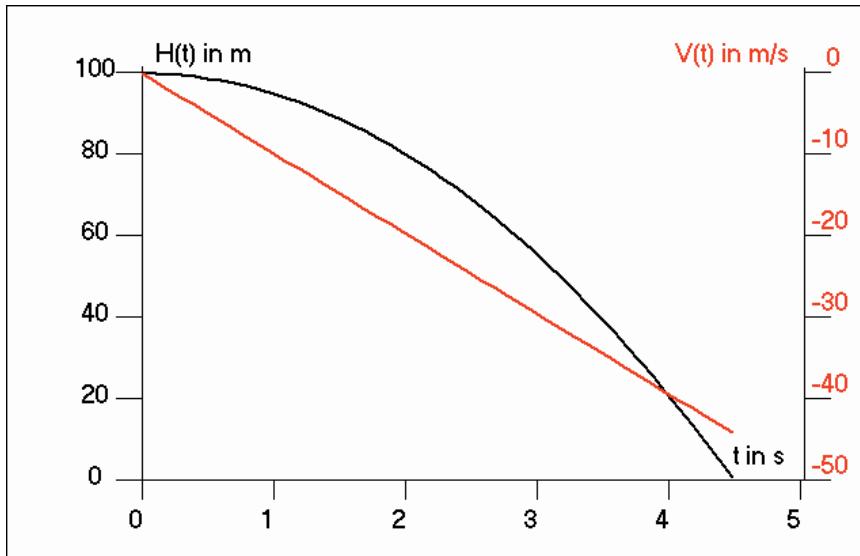


Bild 1.2 Der freie Fall ohne Reibung

Im nächsten Schritt wird die Luftreibung nicht vernachlässigt und im gesamten Geschwindigkeitsbereich Newton-Reibung angenommen, d.h. die auf den Körper einwirkende Reibungskraft ist proportional zum Quadrat seiner Geschwindigkeit.

Aufstellung der Modellgleichungen

Es gilt die Kräftebilanz, d.h. *Summe der Kräfte = Null* bzw.

$$K_T + K_G + K_R = 0 \quad \text{oder}$$

$$M * \frac{dV(t)}{dt} + M * g + \frac{1}{2} * C_w * \rho * A * |V(t)| * V(t) = 0 \quad \text{oder}$$

$$\frac{dV(t)}{dt} = -g - \frac{1}{2 * M} * C_w * \rho * A * |V(t)| * V(t) \quad (1.6)$$

C_w Widerstandskoeffizient des Körpers

ρ Dichte von Luft in kg/m^3

A Querschnittsfläche des Körpers in Fallrichtung in m^2

Die allgemeine Schreibweise $|V(t)| * V(t)$ in Gl. (1.6) berücksichtigt die bei Strömungsvorgängen mögliche Strömungsumkehr, die allerdings im vorliegenden Fall nicht eintritt (bei Strömungsumkehr ändert sich das Vorzeichen der Reibungskraft). Aus der Gl. (1.6) folgt durch Integration ($V(0) = 0 \text{ m/s}$)

$$V(t) = -g * t - \frac{1}{2 * M} * C_w * \rho * A * \int_0^t |V(\tau)| * V(\tau) d\tau$$

und bei Berücksichtigung von $V(t) \leq 0 \text{ m/s}$

$$V(t) = -g * t + \frac{1}{2 * M} * C_w * \rho * A * \int_0^t (V(\tau))^2 d\tau \quad (1.7)$$

Wie die Gl. (1.7) zeigt, verringert sich infolge der Reibung die Geschwindigkeit des Körpers (positives Vorzeichen des Integralterms). Neben der Gl. (1.6) stellt die Gl. (1.2) die zweite Modellgleichung dar. Wie im Fall ohne Luftreibung handelt es sich um ein System bestehend aus zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen. Im stationären Grenzfall ($\frac{dV(t)}{dt} \rightarrow 0$) strebt $V(t)$ gegen den Grenzwert V_{GRENZE} .

Aus der Gl. (1.6) folgt für $\frac{dV(t)}{dt} = 0$ und wegen $V(t) \leq 0 \text{ m/s}$

$$0 = -g + \frac{1}{2 * M} * C_w * \rho * A * V_{\text{GRENZE}}^2 \quad \text{bzw.}$$

$$|V_{\text{GRENZE}}| = \sqrt{\frac{2 * M * g}{C_w * \rho * A}} \quad (1.8)$$

Die numerische Lösung

Statt der komplizierten analytischen Lösung der Gln. (1.2) und (1.6) betrachten wir die numerische Lösung nach dem im Kapitel 2.2 be-

schriebenen Euler-Verfahren. Es gilt für einen Lösungsschritt von (t_0, V_0, H_0) nach $(t_0 + \Delta t, V_1, H_1)$

$$V_1 = V_0 + \Delta t * \left(-g - \frac{1}{2 * M} * C_w * \rho * A * |V_0| * V_0 \right) \quad (1.9)$$

$$H_1 = H_0 + \Delta t * V_0 \quad (1.10)$$

Der Programmierbaustein 1.1 zeigt den Lösungsalgorithmus und das Bild 1.3 die Ergebnisse der Simulation mit folgenden Modellparametern: $H(0) = 100$ m, $V(0) = 0.0$ m/s, $g = 9.81$ m/s², $C_w = 1.0$, $M = 10$ kg, $\rho = 1.29$ kg/m³, $A = 0.3$ m² und $\Delta t = 0.1$ s. Zum Vergleich sind im Bild 1.3 auch die Ergebnisse ohne Luftreibung dargestellt. Die Geschwindigkeit strebt gegen den Grenzwert $V_{\text{GRENZE}} = -22.5$ m/s (siehe Bild 1.3 und Gl. (1.8)).

Algorithmus der numerischen Lösung

```

H(0), V(0), g, Δt, Cw, M, ρ, A; // Parameter festlegen
f1 = Δt*g; // Hilfsgröße
f2 = 0.5 * Δt * Cw * ρ * A / M; // Hilfsgröße
VGRENZE = - SQRT(2 * M * g / (Cw * ρ * A)); // Grenzgeschwindigkeit
ausgeben: VGRENZE;
V0 = V(0); // Startwert der Geschwindigkeit
H0 = H(0); // Startwert der Höhe
FOR k=1 TO 60 DO BEGIN // Anfang der Zeitschleife
    // k = Zähler Zeitschritte, aktuelle Zeit t = k * Δt
    // Euler-Verfahren anwenden
    V1 = V0 - f1 - f2 * ABS(V0) * V0;
    H1 = H0 + Δt * V0;
    V0 = V1; // neuer Startwert der Geschwindigkeit
    H0 = H1; // neuer Startwert der Höhe
END; // Ende der Zeitschleife
Grafik_ausgeben;
```

Programmierbaustein 1.1

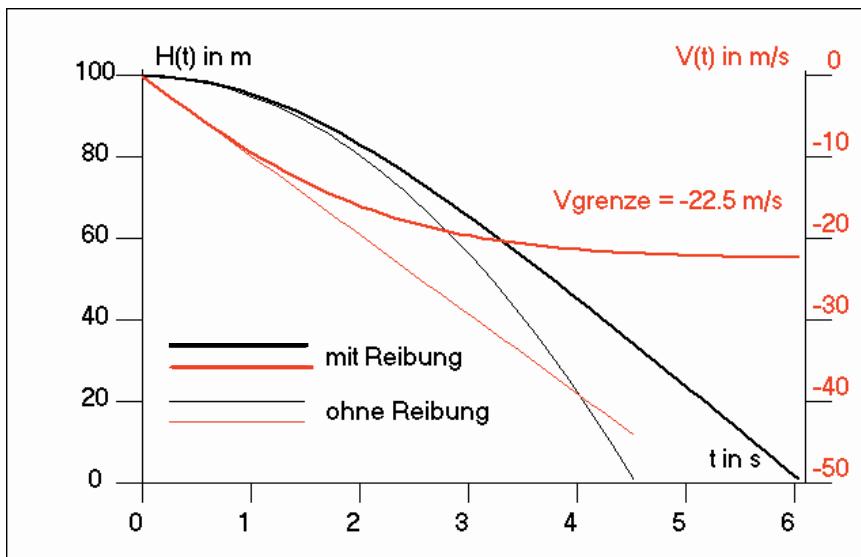


Bild 1.3 Der freie Fall mit Reibung

Bei den Modellgleichungen für den Fall eines Körpers aus einer gegebenen Höhe (unter Berücksichtigung der Luftreibung, Gln. (1.2) und (1.6)) handelt es sich um ein zeitkontinuierliches System, das durch die numerische Lösung (Gln. (1.9) und (1.10)) in ein zeitdiskretes System überführt wird.

2 Simulation zeitkontinuierlicher Systeme

2.1 Der radioaktive Zerfall

Am Beispiel des radioaktiven Zerfalls können zwei wichtige Aspekte der Simulation, nämlich die Genauigkeit und Stabilität der numerischen Lösung, aufgezeigt werden.

Der Zerfall des Kohlenstoff-Isotops C14

Das instabile Isotop C14 wird bei archäologischen Untersuchungen zur Altersbestimmung eingesetzt (C14-Datierung oder Radiokarbonmethode, geeignet für 300 bis 60000 Jahre alte Fundstücke). Durch die kosmische Strahlung wird ein geringer Teil des Stickstoffs der Atmosphäre in das Isotop C14 umgewandelt und anschließend durch den Sauerstoff (O_2) der Atmosphäre zu Kohlendioxid (CO_2) oxidiert.

Der im Kohlendioxid der Atmosphäre enthaltene Kohlenstoff besteht neben dem Isotop C14 im Wesentlichen aus dem stabilen Isotop C12 (über 98 %) und zu etwa 1 % aus dem gleichfalls stabilen Isotop C13. Organische Substanzen nehmen durch Assimilation (Bildung von Kohlehydraten aus Kohlendioxid und Wasser unter Freisetzung von Sauerstoff) Kohlendioxid aus der Atmosphäre auf. Das Mengenverhältnis der aufgenommenen Kohlenstoff-Isotope entspricht dem in der Erdatmosphäre.

Das Isotop C14 zerfällt unter Abgabe von β -Strahlung in das stabile Stickstoff-Isotop N14. Die Halbwertszeit, d.h. die Zeit bis zum Zerfall der Hälfte des ursprünglichen Stoffes, beträgt 5730 Jahre. Ab dem Zeitpunkt ihres Absterbens nimmt eine organische Substanz kein Kohlendioxid mehr auf, d.h. der C14-Gehalt ändert sich nur noch durch den radioaktiven Zerfall. Die C14-Aktivität (bzw. der C14-Gehalt) einer Probe nimmt mit der Zeit exponentiell ab. Aus der gemessenen Aktivität kann auf die Zeit des Absterbens bzw. das Alter der Probe geschlossen werden. Die Zerfallskurve ist im Bild 2.1 und in der Gleichung 2.1 dargestellt.