

## VI. Strukturverhaltende Verfahren

Struktur = essentielle Eigenschaft einer  
(zeitlichen) Entwicklung

Bsp.: (1) Mehrkörpersimulation (N-body simulation)  
Gegeben  $N$  Körper, berechne die  
zeitliche Entwicklung des Systems  
durch Lösen der Bewegungsgleichungen

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = - \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} U_{\text{tot}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad i=1, \dots, N$$

- Newton'sche Bewegungsgl.

wobei  $m_i$  Masse des  $i$ -ten Körpers  
 $\vec{r}_i$  Position "  
 $U_{\text{tot}}$  Totales Potential der  
Wechselwirkung (WW)

Strukturen sind z.B. die Erhaltungsgrößen

(i) Energie  $E = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 + U_{\text{tot}}$

(ii) Impuls  $\vec{P} = \sum_{i=1}^N m_i \cdot \dot{\vec{r}}_i$

(iii) Drehimpuls  $\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i$

## (2) Maxwell-Gleichungen

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = - \vec{\nabla} \times \vec{E} \quad (\text{Faraday})$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{H} - \vec{j} \quad (\text{Ampère})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (\text{Gauss})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{Gauss})$$

wobei

- $\vec{E}$  ... elektrisches Feld
- $\vec{D}$  ... " Flussdichte
- $\vec{H}$  ... magnetisches Feld
- $\vec{B}$  ... " Flussdichte
- $\rho$  ... Ladungsdichte
- $\vec{j}$  ... elektrische Stromdichte

Eine Struktur ist hier z.B.  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ ,  
d.h. es gibt keine magnetischen Monopole.

Die Strukturen aus Bsp. (1) und (2) will man beim Näherungslösen (möglichst gut) erhalten.

Wir betrachten hier nur Bsp. (1) (Bsp. (2) PDE Methoden...)  
sehr einfaches: Yee Verfahren

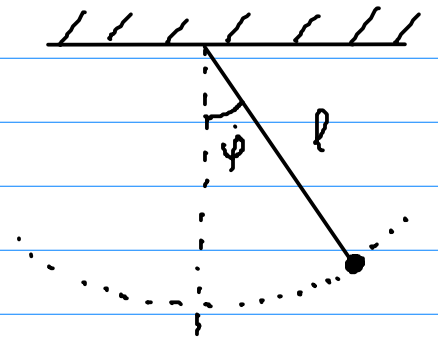
### Bsp.: (3) Physikalisches Pendel

$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{l} \sin(\varphi) = 0$$

Totale Energie

$$E = \underbrace{\frac{m}{2} (l\dot{\varphi})^2}_{\text{kinetische}} + \underbrace{mg l (1 - \cos(\varphi))}_{\text{potentielle}} \quad \downarrow \vec{g} \text{ Schwerkerebeschl.}$$

Energie



Vergleichen wir die kerngelehrten  
Verfahren zur näherungsweise Lösung

→ Slides

Wir beobachten: nur die implizite Mittelpunkts-  
Methode erhält die Energie!

Die implizite Mittelpunkts-Methode ist Teil  
der Familie sog. geometrischer Integratoren.

Ein weiteres Bsp. solcher Verfahren ist das populäre Verlet Verfahren.

Geg. das AWP

$$m \cdot a = F$$

$$v(t=0) = v_0$$

ist das Verlet Verfahren

$$v_{j+\frac{1}{2}} = v_j + \frac{F_j}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

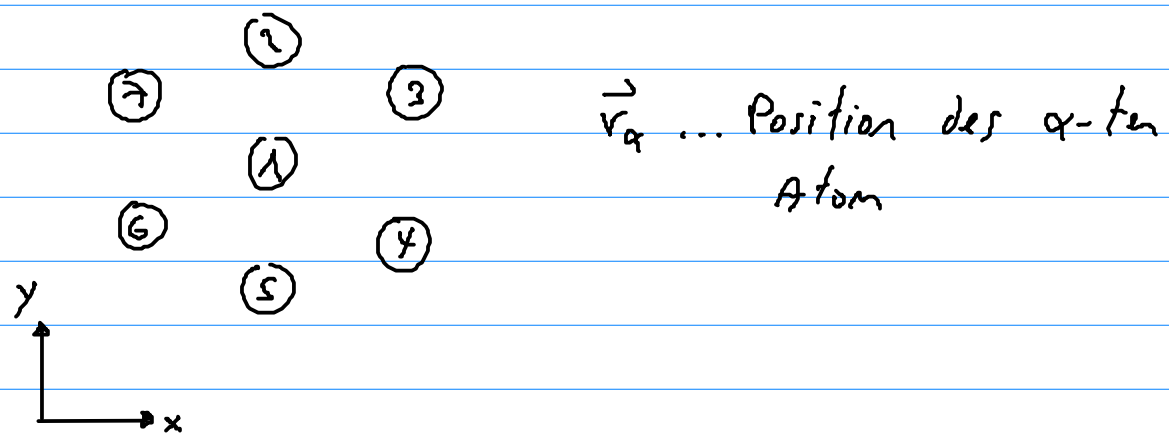
$$r_{j+1} = r_j + v_{j+\frac{1}{2}} \cdot \Delta t$$

$$v_{j+1} = v_{j+\frac{1}{2}} + \frac{F_{j+1}}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

Dieses Verfahren wird oft in der Molekulardynamik (MD) verwendet.

Bsp.: (4) MD mit Verlet (no Übung)

Kleiner gefrorener Argon-Kristall aus  
 $N = 7$  Atomen



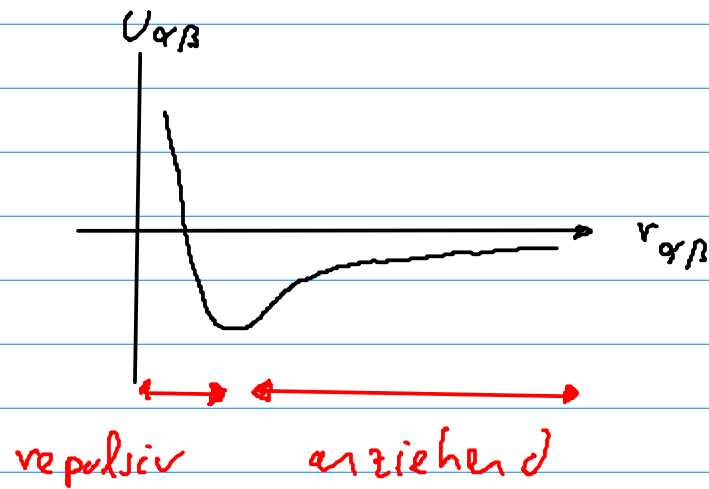
Die WW zwischen den Atomen soll durch ein Lennard-Jones Potential beschrieben sein

$$U_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) = \epsilon \cdot \left( \left( \frac{b}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left( \frac{b}{r_{\alpha\beta}} \right)^6 \right)$$

Potential der WW von Atom  $\alpha$  mit Atom  $\beta$   
 $\epsilon$  und  $b$  sind Konstanten und das Potential hängt nur vom Abstand  $a$

$$\vec{r}_{\alpha\beta} = \vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta, \quad r_{\alpha\beta} = |\vec{r}_{\alpha\beta}|$$

Das Potential hat folgende Gestalt



Das Totale Potential des Systems erhält man durch summieren

$$U_{\text{tot}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}} U_{\alpha\beta}$$

Die Bewegungsgl. lauten dann

$$m \ddot{\vec{r}}_{\alpha} = \vec{F}_{\alpha} = - \frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial \vec{r}_{\alpha}}$$

Mit Verlet und ode45 lösen ...

→ slides