

25.05.20

Nicht Prüfungsstoff. Trotzdem interessant :~)

1

II. 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

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

~ Newtonsche Bewegungsgl.

wobei m_i Masse des i -ten Körpers

\vec{r}_i Position

U_{tot} Totales Potential der
Wechselwirkung (WW)

Strukturen sind z.B. die Erhaltungsgrößen

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

$$(ii) \text{ Impuls} \quad \vec{P} = \sum_{i=1}^N m_i \cdot \vec{v}_i$$

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

(2) Maxwell-Gleichungen

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

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

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

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

wobei \vec{E} ... elektrisches Feld

\vec{D} ... " Flussdichte

\vec{H} ... magnetisches Feld

\vec{B} ... " Flussdichte

s ... Ladungsdichte

\vec{j} ... elektrische Stromdichte

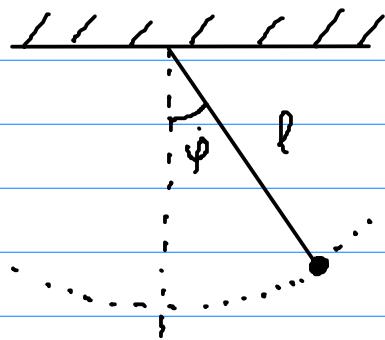
Eine Struktur ist hier z.B. $\vec{D} \cdot \vec{B} = 0$,
d.h. es gibt keine magnetischen Monopole.

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

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

Bsp.: (3) Physikalisches Pendel

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



Total Energy

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

Vergleichen wir die herengelernten Verfahren zur näherungsweisen Lösung

→ Slides

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

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

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

Geg. das AWP

$$m \cdot a = F$$

$$r(t=0) = r_0$$

ist das Verlet Verfahren

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

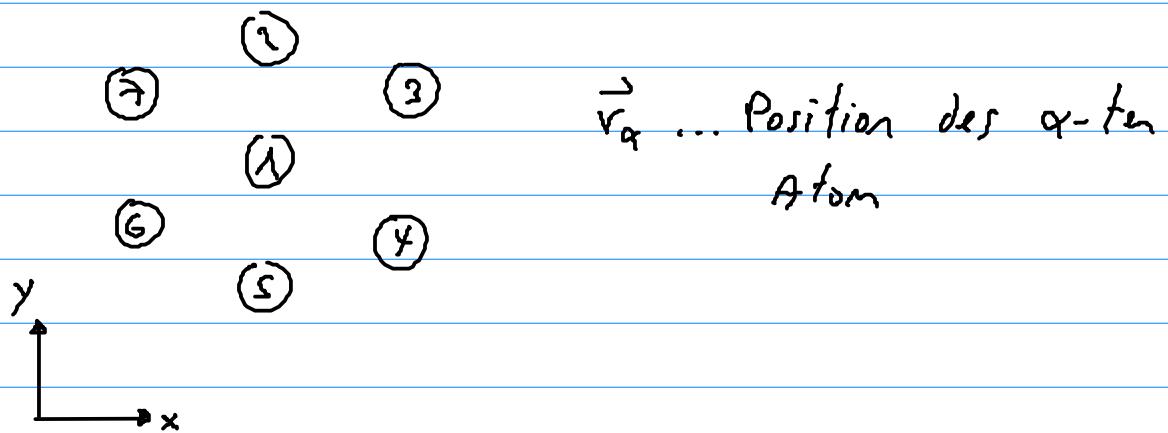
$$r_{j+1} = r_j + v_{j+1/2} \cdot \Delta t$$

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

Dieses Verfahren wird oft in der Molekular-Dynamik (MD) verwendet.

Bsp.: (4) ND mit Verlet (no Übung)

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



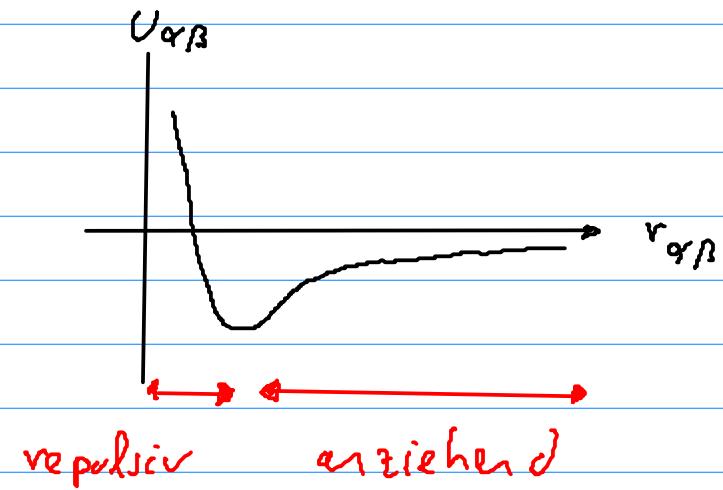
Die Kräfte zwischen den Atomen soll durch ein Lennard-Jones Potential beschrieben sein

$$U_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) = 4 \cdot \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}} \right)^6 \right)$$

Potential der Wechselwirkung von Atom α mit Atom β
 ε und σ sind Konstanten und das Potential hängt nur vom Abstand ab

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

Das Potential hat folgende Gestalt



Das Totale Potential des Systems erhält man durch summieren

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

Die Bewegungsgl. lauten dann

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

Mit Verlet und odesys lösen...

→ Slides