

Dieses Kapitel haben wir nur sehr oberflächlich in der letzten VL am 30.05.22 behandelt.
 Deshalb ist für die Prüfung nur relevant zu wissen, dass es spezielle Verfahren gibt, sog. geometrische Integrator, \wedge
 welche gewisse Erhaltungsgrößen (z.B. Energie) erhalten. \vee (z.B. implizite Mittelpunkts- und Störmer-Verlet Verfahren.)

VI. Strukturverhaltende Verfahren

Struktur = essentielle Eigenschaft einer
 (zeitlichen) Entwicklung

Wir betrachten nur ein paar einfache Bsp. Weiteres
 finden Sie in spez. VLen und/oder Literatur.

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_{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 $\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i$

Bsp.: (2) Physikalisches Pendel

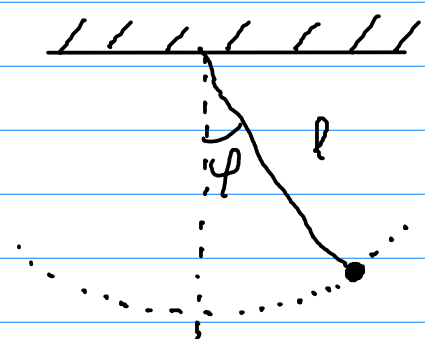
$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{l} \sin(\varphi) = 0$$

$\underbrace{\quad}_{\approx \varphi}$ sog. mathematisches Pendel
 $\rho \ll l$

Totale Energie

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

Energie



Vergleichen wir die kerngelernten
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
(welche gewisse geometrische Eigenschaften der
exakten Lösung erhalten. Hier z.B. die Energie).

Ein weiteres Bsp. solcher Verfahren ist das populäre (Störmer-) Verlet Verfahren.

Geg. das AWP

$$m \cdot a = F(r)$$

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

Kraft hängt nur vom Potential ab

lautet (eine Variante) das Verfahren

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

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

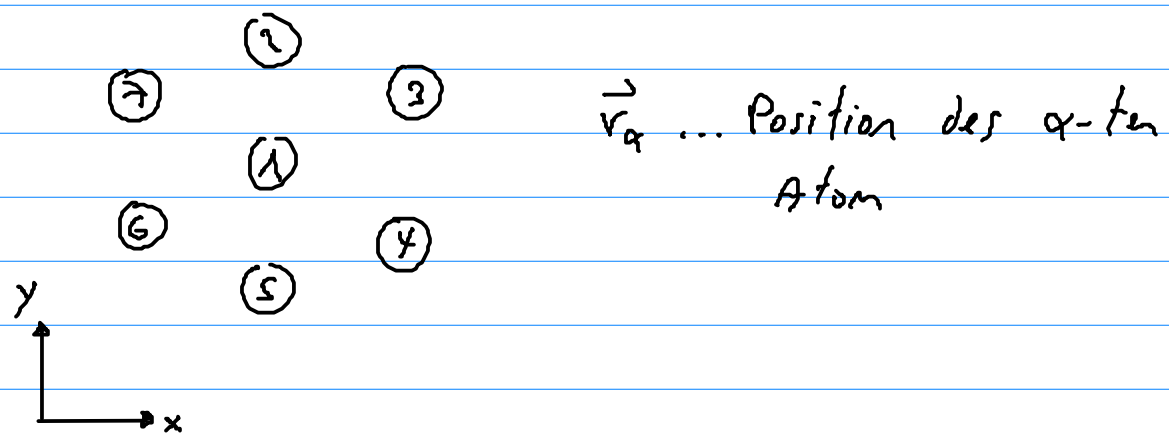
$$v_{j+1} = v_{j+1/2} + \frac{F_{j+1}}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

Dieses Verfahren wird oft in der Molekulardynamik (MD) verwendet. (Auch in der Fluid Dynamik, Astrophysik, ...)

Bsp.: (3) MD mit Verlet (no Übung)

Kleiner gefrorener Argon-Kristall aus

$N = 7$ Atomen



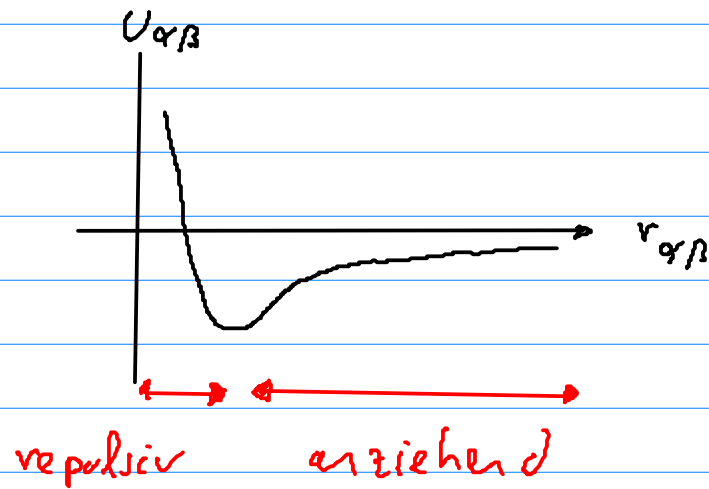
Die WW zwischen den Atomen soll durch ein Lennard-Jones Potential beschrieben sein

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

Potential der WW von Atom α mit Atom β
 ϵ 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

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

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

Bsp. (4) 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

Permittivität $(\epsilon \vec{E} =) \vec{D}$... " Flussdichte

Permeabilität \vec{H} ... magnetisches Feld

$(\mu \vec{H} =) \vec{B}$... " Flussdichte

ρ ... Ladungsdichte

\vec{j} ... elektrische Stromdichte

Eine Struktur ist hier z.B. $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$,

d.h. es gibt keine magnetischen Monopole.

Vereinfachen wir das ganze und betrachten die Gleichungen im Vakuum:

$$\left(\text{d.h. } \vec{s} = \vec{j} = 0, \quad \vec{D} = \underbrace{\epsilon_0}_{\text{Vakuum Permittivität}} \vec{E}, \quad \vec{B} = \underbrace{\mu_0}_{\text{Permeabilität}} \vec{H} \right)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$\underbrace{\hspace{2cm}}$

$\frac{1}{c^2}$

~ Lichtgeschwindigkeit

Diese Gleichungen kann man umformen zu

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{E} = 0$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{B} = 0$$

Dies sind Wellengleichungen und beschreiben die Felder von elektromagnetischen Wellen. Die Wellengleichung ist das Standard-Bsp. für sog. hyperbolische partielle Diff.-Gl. (PDEs). Solche Gl. tauchen oft auf in der Beschreibung von Naturgesetzen (z.B.

Maxwell-Gleichungen, Fluid Dynamik, Einsteinsche Feldgleichungen der Allgemeinen Relativitäts-Theorie, ...) und es gibt spezielle numerische Verfahren. Dies geht natürlich weit über die VL hinaus... Wir machen jedoch ein paar Bsp.

Bevor wir kurz zu einem Verfahren für die Maxwell-Gleichungen, betrachten wir ein viel einfacheres Bsp. und lernen ein paar Grundlagen beim Lösen von hyperbol. PDEs kennen.

Bsp.: (5) Die lineare Advektions-Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

beschreibt den Transport einer Größe $u(x, t)$ mit der konstanten (Advektions-) Geschwindigkeit a .

Nehmen wir als Gebiet $-\infty < x < \infty$ und die Anfangsbedingung zur Zeit $t = 0$

$$u(x, 0) = u_0(x)$$

wobei $u_0(x)$ irgend eine Funktion ist. Dann ist die Lösung geg. durch

$$u(x, t) = u_0(x - a \cdot t)$$

(was man einfach durch einsetzen überprüft).

Die Anfangsbedingung wird also einfach mit der (Advektions-) Geschwindigkeit ($a > 0$ nach links, $a < 0$ nach rechts) advektiert bzw. transportiert.

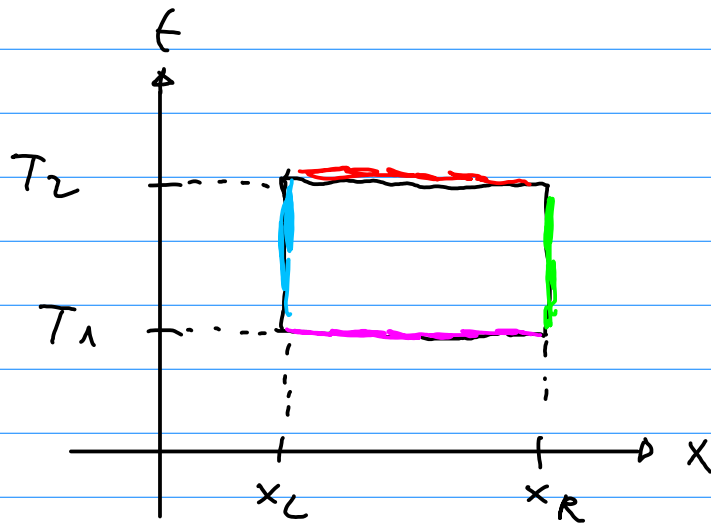
Die lineare Advektions-Gleichung ist eine sog. Erhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \int_{T_1}^{T_2} \int_{x_L}^{x_R} dt dx$$

$$\int_{T_1}^{T_2} \int_{x_L}^{x_R} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} \right) dt dx = 0$$

Integration über den Raum-Zeit-Würfel $[T_1, T_2] \times [x_L, x_R]$

$$\int_{x_L}^{x_R} \left(\underline{u(x, T_2)} - \underline{u(x, T_1)} \right) dx + \int_{T_1}^{T_2} \left(\underline{a(u(t, x_R))} - \underline{a(u(t, x_L))} \right) dt = 0$$

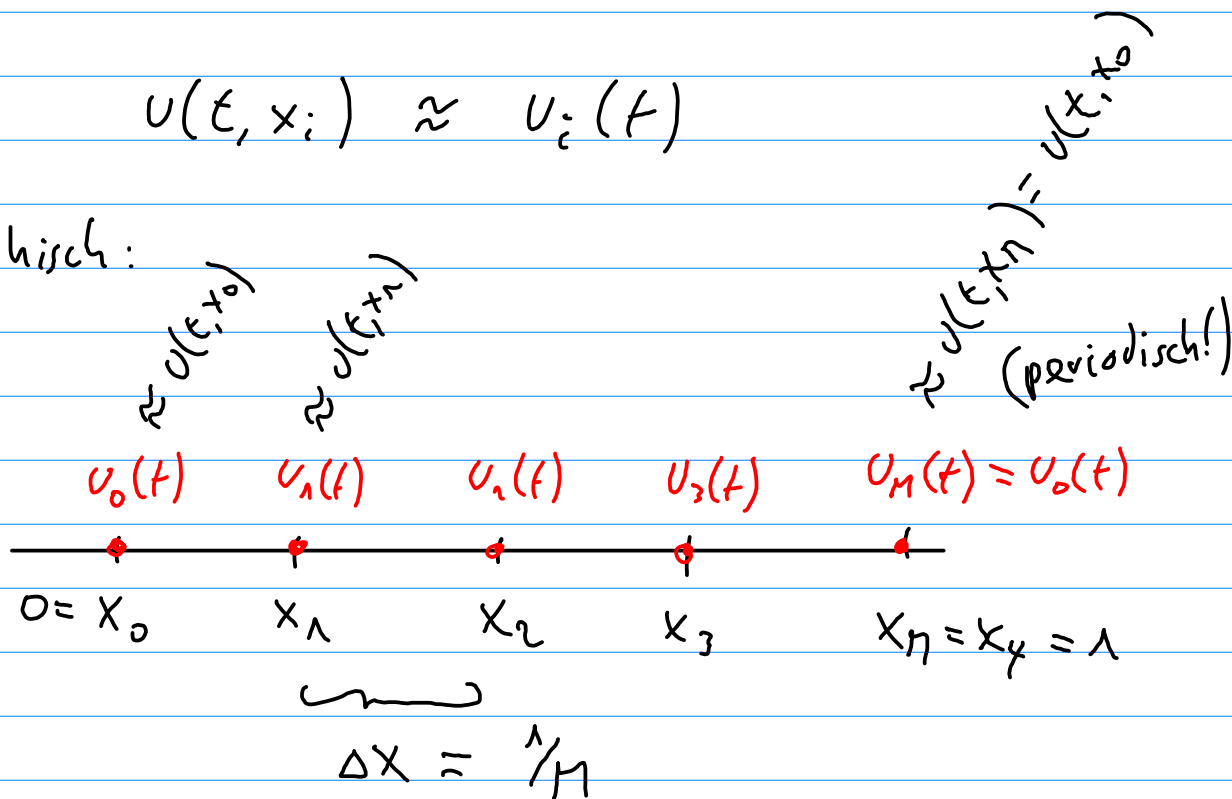


Erhaltungsgesetze (und deren Gleichungen) sind allgegenwärtig in der Natur.

Probieren wir ein numerisches Verfahren mit der Linien-Methode (s. Bsp. (14) von Kap. I) zu konstruieren. Hierzu diskretisieren wir den Raum mit einem $(M+1)$ -Gitter (grid/mesh), wobei wir periodische Randbedingungen (der Einfachheit halber) annehmen. Die Grösse u approximieren wir dann an den Gitterknoten $x_i = i \cdot \Delta x$

$$u(t, x_i) \approx u_i(t)$$

Graphisch:



Nun approximieren wir die PDE im Raum

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} \quad \text{zentrierte Finite Differenzen} \\ \text{(s. Kap. 1, Serie 2)}$$

$$\approx -a \frac{u_{i+n}(t) - u_{i-n}(t)}{2\Delta x} = \frac{d}{dt} u_i(t)$$

für $i=0, \dots, M-1$.

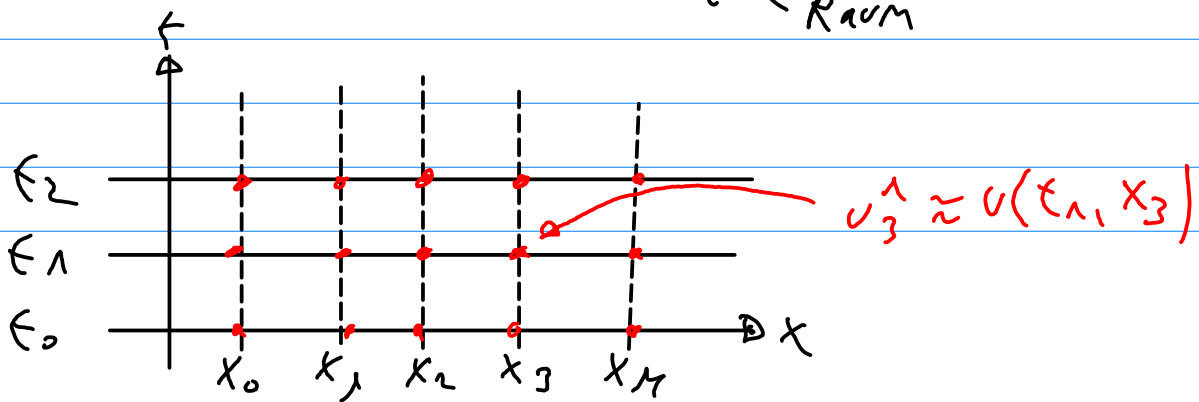
Nehmen wir nun in der Zeit das einfachste Verfahren das wir kennen, expliziter Euler, erhalten wir:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \frac{u_{i+n}^n - u_{i-n}^n}{2\Delta x}$$

oder

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+n}^n - u_{i-n}^n)$$

wobei $u(t^n, x_i) \approx u_i^n$ $\left. \begin{array}{l} \text{Zeit} \\ \text{Raum} \end{array} \right\} \text{Index}$.



Leider ist dieses Verfahren unbrauchbar:
es ist instabil!

(und dies egal wie klein der Zeitschritt Δt oder Gitterkonstante Δx ist!)

Dies kann man ähnlich wie in Bsp. (14) von Kap. V verstehen: die Eigenwerte des ODE-Systems sind rein imaginär (s. auch Serie 12, Aufgabe 3) und der explizite Euler kann diese nicht stabil integrieren.

Neuer Versuch mit

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} \approx -a \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\text{oder } u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a \Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n)$$

Dies ist stabil für $0 \leq a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$.

Beachte: Es muss $a > 0$ gelten!

Dieses Verfahren wird in der Literatur als first-order upwind scheme bezeichnet, weil der Fehler proportional zu $\Delta t, \Delta x$ ist und die einseitige Finite Differenz

$$a \frac{\partial u}{\partial x} \approx a \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$$

nur Information von links nimmt.

Also woher der "Wind bläst" für $a > 0$.

Um die Brauchbarkeit (sprich Stabilität) von solchen (linearen) Differenzengleichungen zu untersuchen, ist die sog. von Neumann Stabilitätsanalyse (oft) ein zweckmässiges Werkzeug.

Die Idee ist die numerische Lösung als Superposition von Wellen zu betrachten.

Dazu schreiben wir die numerische Lösung am Ort $x_i = i \cdot \Delta x$ und Zeit t^n als Fourier-Reihe

$$u_i^n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}^n(\varphi) e^{i \varphi \overbrace{i \Delta x}^{x_i}} d\varphi$$

\uparrow x_i Buchstabe \swarrow imaginäre Einheit

Damit kann man (lineare) Differenzenverfahren wie folgt schreiben

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}^n(\varphi) G(\varphi, \Delta x, \Delta t) e^{i \varphi i \Delta x} d\varphi$$

wobei $G(\varphi, \Delta x, \Delta t)$ der Verstärkungsfaktor (amplification factor) genannt wird da

$$\hat{u}^{n+1}(\varphi) = G(\varphi, \Delta x, \Delta t) \hat{u}^n(\varphi).$$

Ein Verfahren ist nun stabil, falls

$$|G(\varphi, \Delta x, \Delta t)| \leq 1.$$

Dank dem Superpositionsprinzip, reicht es i. A. dies für irgendein φ zu tun:

$$u_i^n = \hat{u}_i^n e^{i\varphi i \Delta x}.$$

Bsp.: (6) Instabilität von

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a \Delta t}{2 \Delta x} (u_{i+\frac{1}{2}}^n - u_{i-\frac{1}{2}}^n)$$

$$\hat{u}^{n+1} e^{i\varphi \Delta x} = \hat{u}^n e^{i\varphi \Delta x} - \frac{a \Delta t}{2 \Delta x} \hat{u}^n \left(e^{i\varphi(i+\frac{1}{2})\Delta x} - e^{i\varphi(i-\frac{1}{2})\Delta x} \right)$$

Kürzen von
 $e^{i\varphi \Delta x}$

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left(1 - \frac{a \Delta t}{2 \Delta x} \underbrace{\left(e^{+i\varphi \Delta x} - e^{-i\varphi \Delta x} \right)}_{2 \cdot i \cdot \sin(\varphi \Delta x)} \right)$$

$$= \underbrace{\left(1 - i \cdot \frac{a \Delta t}{\Delta x} \sin(\varphi \Delta x) \right)}_{G(\varphi, \Delta x, \Delta t)} \hat{u}^n$$

$$= G(\varphi, \Delta x, \Delta t) \hat{u}^n$$

$$|G(\varphi, \Delta x, \Delta t)|^2 = \left| 1 - i \frac{a \Delta t}{\Delta x} \sin(\varphi \Delta x) \right|^2$$

$$= 1 + \left(\frac{a \Delta t}{\Delta x} \right)^2 \sin^2(\varphi \Delta x) \geq 1$$

Also instabil!

Bsp.: (7) Stabilität von ($a > 0$)

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \frac{a \Delta t}{\Delta x} (v_i^n - v_{i-1}^n)$$

$$\hat{v}_i^{n+1} e^{I \varphi i \Delta x} = \hat{v}_i^n e^{I \varphi i \Delta x} - \frac{a \Delta t}{\Delta x} \hat{v}_i^n (e^{I \varphi i \Delta x} - e^{I \varphi (i-1) \Delta x})$$

kürzen $e^{I \varphi i \Delta x}$

$$\hat{v}_i^{n+1} = \hat{v}_i^n \left(1 - \frac{a \Delta t}{\Delta x} (1 - e^{-I \varphi \Delta x}) \right)$$

$$\cos(\varphi \Delta x) - I \sin(\varphi \Delta x)$$

$$= \left(1 - \frac{a \Delta t}{\Delta x} (1 - \cos(\varphi \Delta x)) - I \sin(\varphi \Delta x) \right) \hat{v}_i^n$$

$$= G(\varphi, \Delta x, \Delta t) \hat{v}_i^n$$

$$|G(\varphi, \Delta x, \Delta t)|^2 = \dots \leq 1$$

$$\Leftrightarrow 0 \leq \frac{a \Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

für Stabilität.

Betrachten wir nun zum Schluss die Maxwell-Gleichungen in zwei Dimensionen mit $\rho = \vec{j} = 0$:

$$\frac{\partial D_x}{\partial t} = + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{B_z}{\mu} \right)$$

$$\frac{\partial D_y}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{B_z}{\mu} \right)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{D_y}{\epsilon} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{D_x}{\epsilon} \right)$$

Dies ist der sog. Transverse Electric (TE) mode.

Ein einfacher und robusteres Verfahren ist das sog. Yee-Verfahren (oder auch Finite-Difference Time-Domain FDTD method):

$$D_{x, i, j+1/2}^{n+1} = D_{x, i, j+1/2}^n + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[\frac{1}{\mu} \left(B_{z, i, j+1}^{n+1/2} - B_{z, i, j}^{n+1/2} \right) \right]$$

$$D_{y, i+1/2, j}^{n+1} = D_{y, i+1/2, j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{1}{\mu} \left(B_{z, i+1, j}^{n+1/2} - B_{z, i, j}^{n+1/2} \right) \right]$$

$$B_{z, i, j}^{n+1/2} = B_{z, i, j}^{n-1/2} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(D_{y, i+1/2, j}^n - D_{y, i-1/2, j}^n \right) \right] + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[\frac{1}{\epsilon} \left(D_{x, i, j+1/2}^n - D_{x, i, j-1/2}^n \right) \right]$$

Die Diskussion dieses Verfahren sprengt natürlich den Inhalt der VL :-).
Eventuell sehen wir etwas in den Übungen.