Lösung 13

1. *Mehrkörpersimulation*

Wir beobachten, dass die Schrittweiten kleiner werden, wenn die Körper näher sind.

2. *Molekular-Dynamik mit dem Verlet-Algorithmus*

In Abb. 1 ist der zeitliche Verlauf der totalen Energie in der MD-Simulation gezeichnet. Es ist klar (aus elementarer Physik!), dass die totale Energie eine Erhaltungsgrösse ist. Wir beobachten, dass der `ode45` diese nicht erhällt. Der Verlet-Algorithmus (bis auf kleine Fluktuation) jedoch schon! Es lässt sich zeigen, dass der Verlet-Algorithmus Energie erhällt. Dieses Verfahren erhällt auch noch weitere Grössen (z.B. Drehimpuls, ...) und ist deshalb sehr populär in Mehr-Körper-Simulationen.

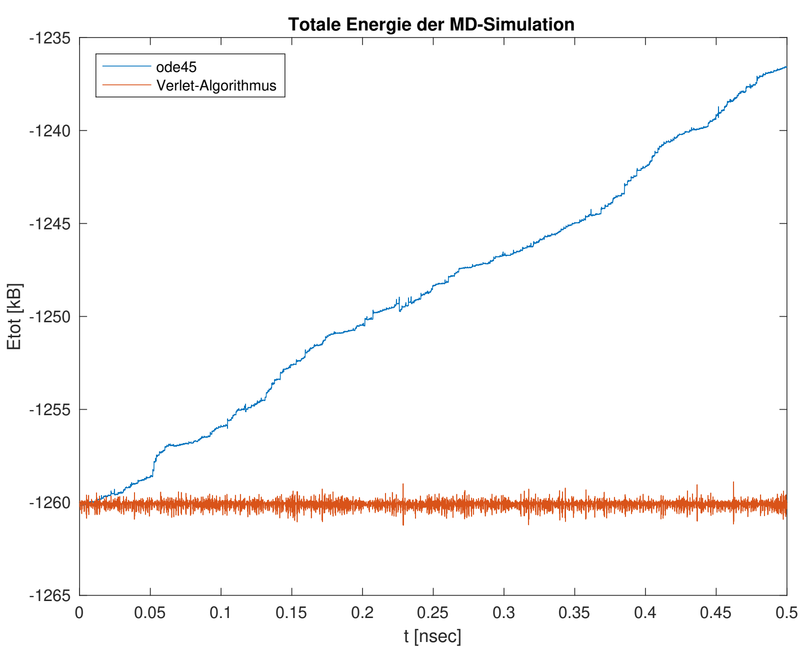

Abbildung 1: Zeitliche Entwicklung der totalen Energie in der MD-Simulation für die beiden Löser.

3. *Lineare Advektions-Gleichung*

a) Nichts hinzuzufügen.

b) Wie in der Vorlesung (Kapitel 6) beschrieben, entwickelt die von Neumann Stabilitätsalyse die numerische Lösung in Fourier-Modes (es reicht einen einzigen Mode zu betrachten):

$$u_i^n = \hat{u}^n e^{I\xi i\Delta x}$$

wobei I die imaginäre Einheit bezeichnet.

(i) Die Stabilitätsalyse liefert

$$\begin{aligned}
u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}\left(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n\right) \\
\hat{u}^{n+1} e^{I\xi i\Delta x} &= \hat{u}^n e^{I\xi i\Delta x} - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}\left(\hat{u}^n e^{I\xi(i+1)\Delta x} - \hat{u}^n e^{I\xi(i-1)\Delta x}\right) \\
\hat{u}^{n+1} &= \hat{u}^n \left(1 - \frac{a\Delta t}{2\Delta x}\underbrace{\left(e^{+I\xi\Delta x} - e^{-I\xi\Delta x}\right)}_{2I\sin(\xi\Delta x)}\right) \\
&= \left(1 - I\frac{a\Delta t}{\Delta x}\sin(\xi\Delta x)\right)\hat{u}^n \\
&= G(\xi, \Delta x, \Delta t)\hat{u}^n.
\end{aligned}$$

Also ist der Verstärkungsfaktor

$$G(\xi, \Delta x, \Delta t) = 1 - I\frac{a\Delta t}{\Delta x}\sin(\xi\Delta x)$$

und dessen Betrag ist

$$|G(\xi, \Delta x, \Delta t)|^2 = |1 - I\frac{a\Delta t}{\Delta x}\sin(\xi\Delta x)|^2 = 1 + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2(\xi\Delta x) \geq 1.$$

Dies bestätigt die in **a)** beobachtete Instabilität dieses Verfahrens.

(ii) Die Stabilitätsalyse liefert

$$\begin{aligned}
u_i^{n+1} &= u_i^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(u_i^n - u_{i-1}^n\right) \\
\hat{u}^{n+1} e^{I\xi i\Delta x} &= \hat{u}^n e^{I\xi i\Delta x} - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(\hat{u}^n e^{I\xi i\Delta x} - \hat{u}^n e^{I\xi(i-1)\Delta x}\right) \\
\hat{u}^{n+1} &= \hat{u}^n \left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - e^{-I\xi\Delta x}\right)\right) \\
&= \hat{u}^n \left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \cos(\xi\Delta x) + I\sin(\xi\Delta x)\right)\right) \\
&= \left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right) - I\frac{a\Delta t}{\Delta x}\sin(\xi\Delta x)\right)\hat{u}^n \\
&= G(\xi, \Delta x, \Delta t)\hat{u}^n.
\end{aligned}$$

Siehe nächstes Blatt!

Also ist der Verstärkungsfaktor

$$G(\xi, \Delta x, \Delta t) = 1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \cos(\xi \Delta x)\right) - I\frac{a\Delta t}{\Delta x}\sin(\xi\Delta x)$$

und dessen Betrag ist

$$\begin{aligned}
|G(\xi, \Delta x, \Delta t)|^2 &= \left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right)\right)^2 + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2(\xi\Delta x) \\
&= 1 - 2\frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right) + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right)^2 \\
&\quad + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2(\xi\Delta x) \\
&= 1 - 2\frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right) + 2\left(\frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right) \\
&= 1 - 2\frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)\left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right).
\end{aligned}$$

Da stets gilt

$$\left(1 - \cos(\xi\Delta x)\right) \geq 0$$

muss also der Faktor

$$2\frac{a\Delta t}{\Delta x}\left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x}\right)$$

positiv sein damit das Verfahren stabil ist (d.h. $|G| \leq 1$). Dies ist für $0 < \frac{a\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ erfüllt und damit ist Vefahren in diesem Intervall stabil. Dies bestätigt die in **b)** beobachtete Instabilität dieses Verfahrens.

(iii) Per Vergleich mit dem vorherigen Verfahren findet man das Stabilitätsintervall: $-1 < \frac{a\Delta t}{\Delta x} < 0$.