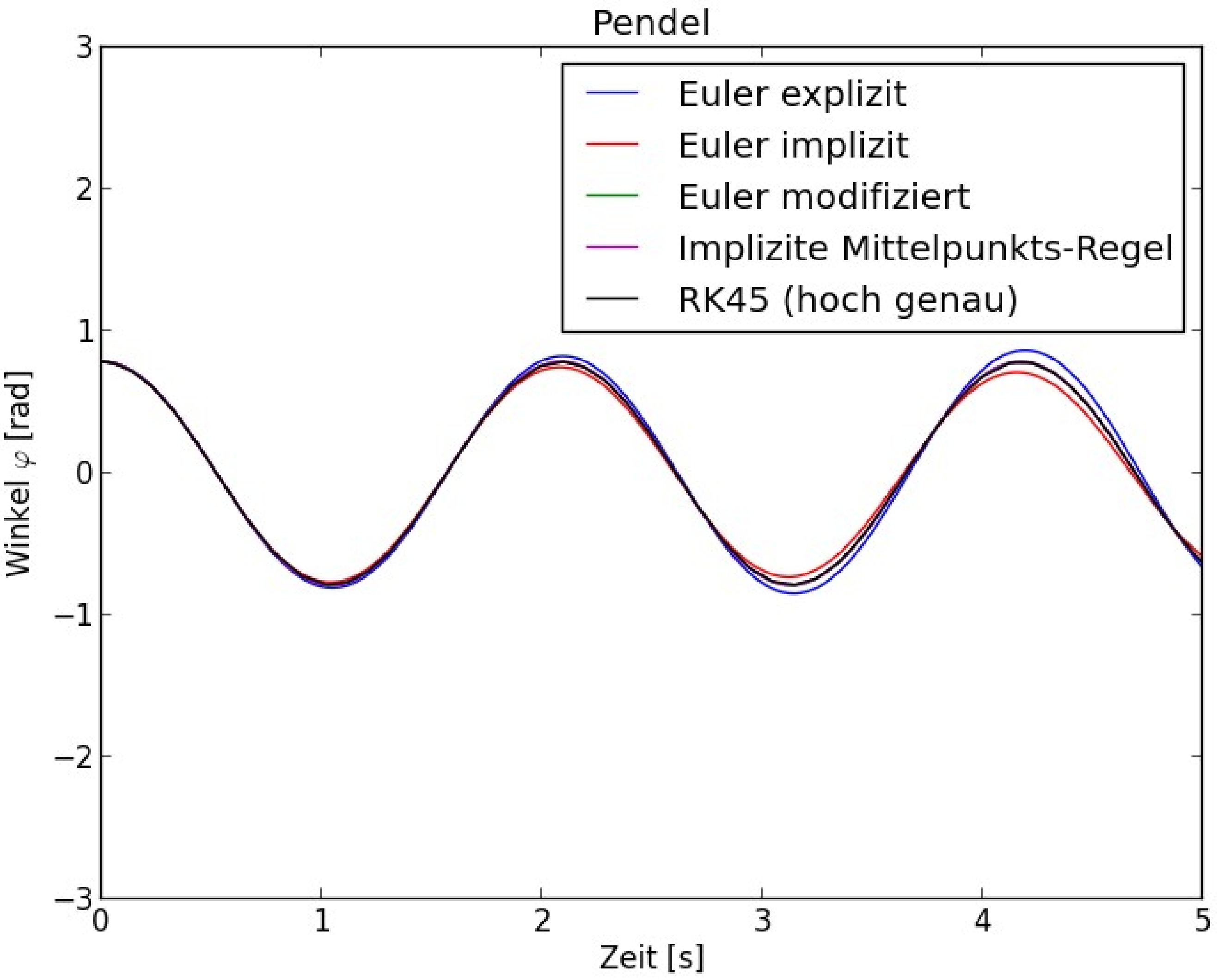
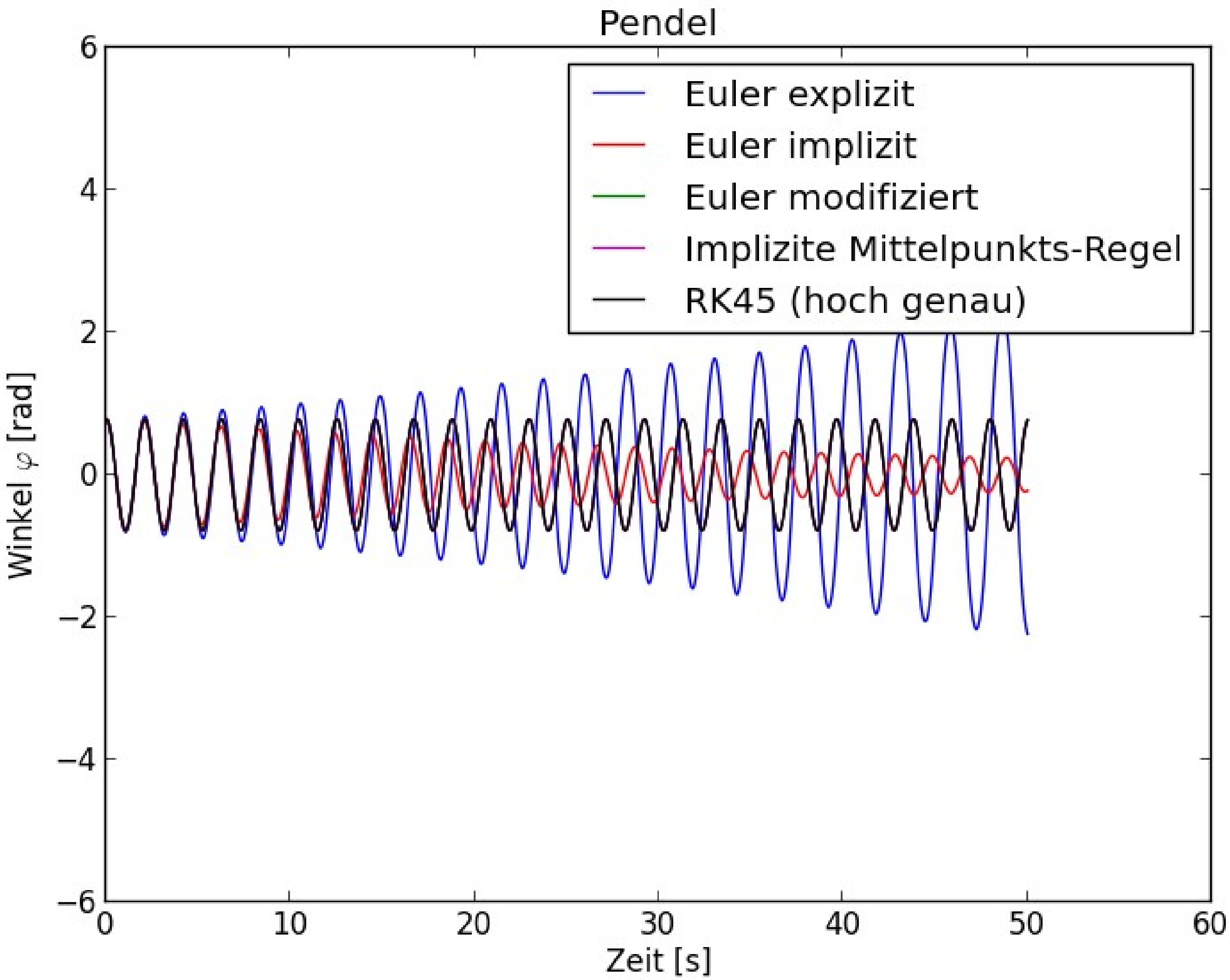
Bsp. (2)



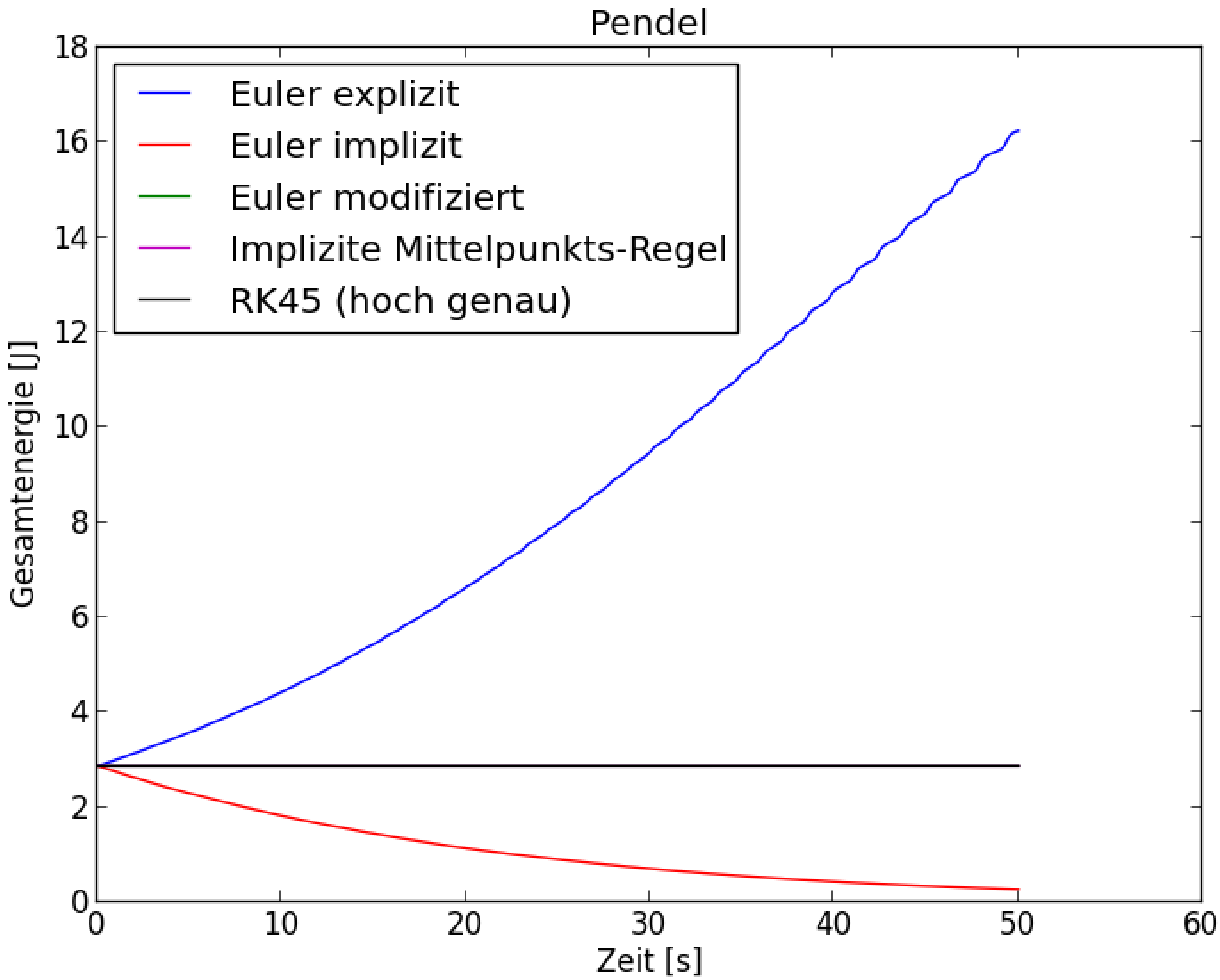
Pendel
Euler explizit
Euler implizit
Euler modifiziert
Implizite Mittelpunkts-Regel
RK45 (hoch genau)
Winkel φ [rad]
Zeit [s]
3
2
1
0
−1
−2
−3
0
1
2
3
4
5

Bsp. (2)

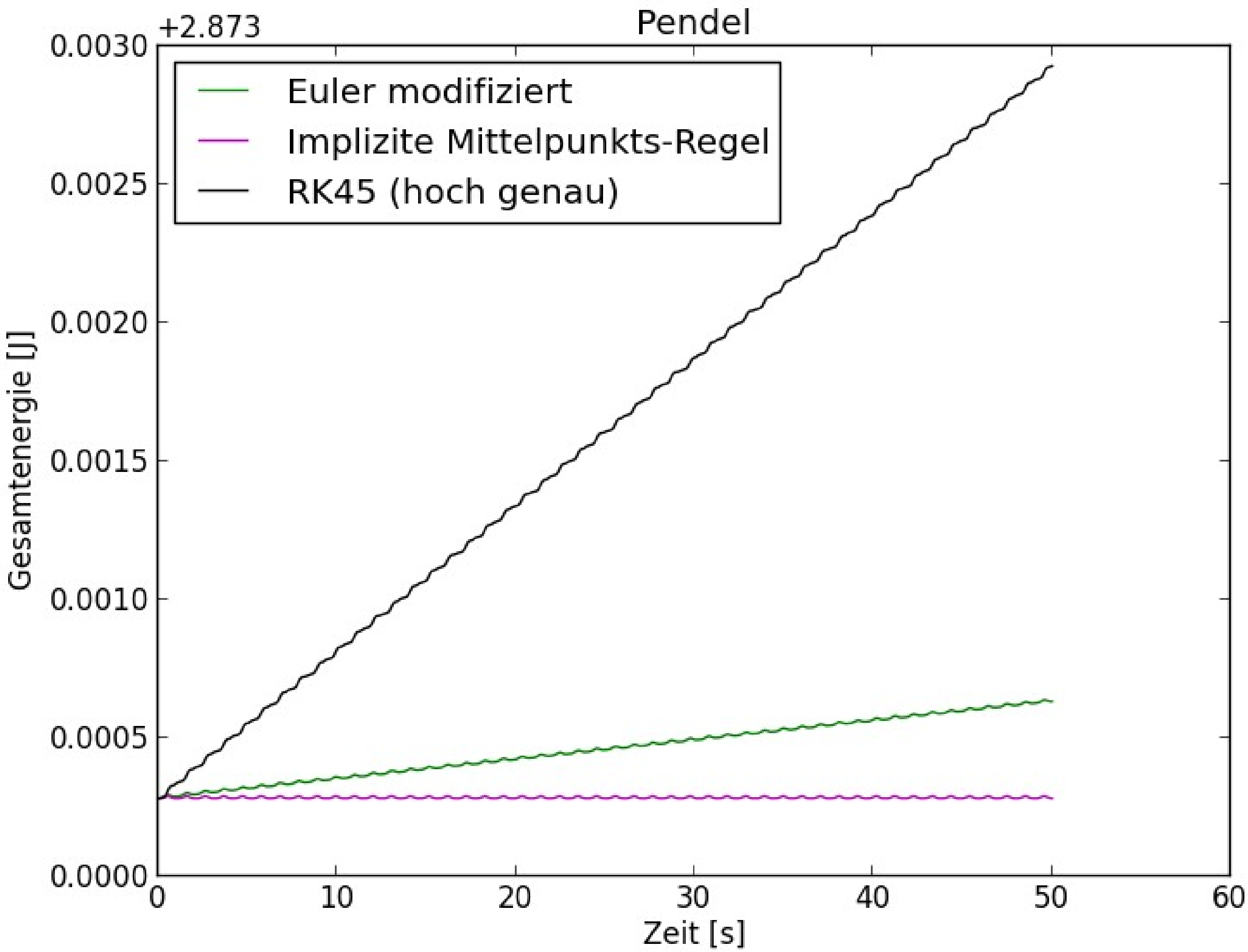


Pendel
Euler explizit
Euler implizit
Euler modifiziert
Implizite Mittelpunkts-Regel
RK45 (hoch genau)
Winkel φ [rad]
Zeit [s]
6
4
2
0
−2
−4
−6
0
10
20
30
40
50
60

Bsp. (2)


Pendel
Euler explizit
Euler implizit
Euler modifiziert
Implizite Mittelpunkts-Regel
RK45 (hoch genau)
Gesamtenergie [J]
Zeit [s]
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
0
10
20
30
40
50
60

Bsp. (2)


Pendel
+2.873
0.0030
0.0025
0.0020
0.0015
0.0010
0.0005
0.0000
Gesamtenergie [J]
0
10
20
30
40
50
60
Zeit [s]
Euler modifiziert
Implizite Mittelpunkts-Regel
RK45 (hoch genau)

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

Geg. das AWP

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

Kraft hängt nur vom Potential ab

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

lautet (eine Variante) das Verfahren

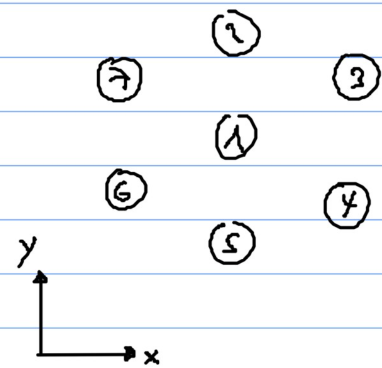
$$v_{j+1/2} = v_j + \frac{F_j}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

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

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

Bsp.: (3) MD mit Verlet (→ Übung)

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



$\vec{r}_\alpha$ ... Position des α-ten Atom

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

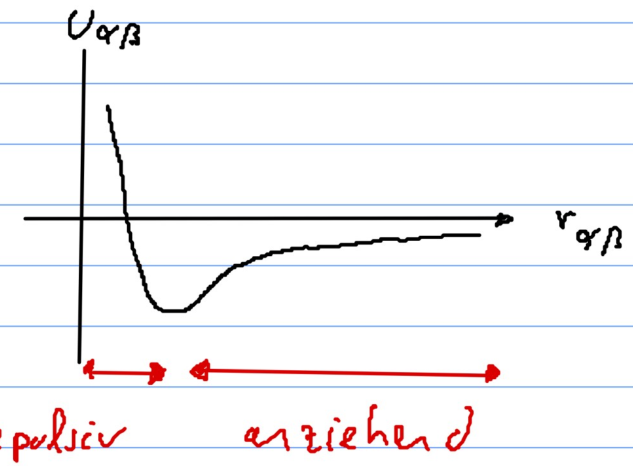
$$U_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) = 4 \cdot \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}} \right)^{6} \right)$$

Potential der WW von Atom α mit Atom β

ε und σ sind Konstanten und das Potential hängt nur vom Abstand ab

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

Das Potential hat folgende Gestalt



Das Totale Potential des Systems erhält man durch summieren

$$U_{tot}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta\neq\alpha}} U_{\alpha\beta}$$

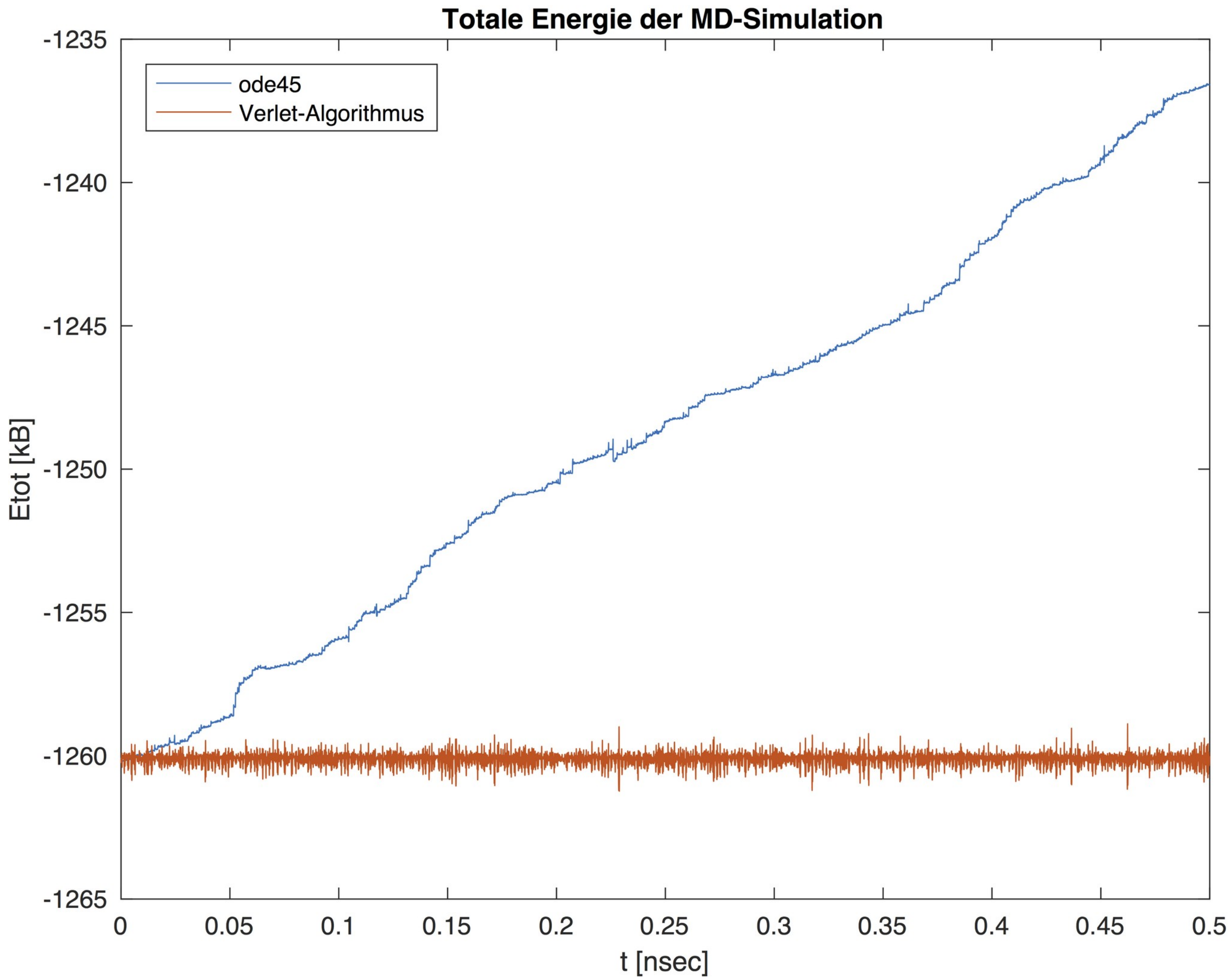
Die Bewegungsgl. lauten dann

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

Mit Verlet und ode45 lösen ...

$\rightsquigarrow$ Slides

Bsp. (3)



Totale Energie der MD-Simulation
ode45
Verlet-Algorithmus
-1235
-1240
-1245
-1250
-1255
-1260
-1265
Etot [kB]
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
0.35
0.4
0.45
0.5
t [nsec]

Bp.: (4) Maxwell-Gleichungen

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

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

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \varrho \qquad \text{(Gauss)}$$

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

wobei $\vec{E}$ ... elektrisches Feld

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

Permittivität

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:
(d.h. $\rho = \vec{j} = 0$, $\vec{D} = \underbrace{\varepsilon_0}_{\text{Vakuum Permittivität}} \vec{E}$, $\vec{B} = \underbrace{\mu_0}_{\text{Permeabilität}} \vec{H}$

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

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \qquad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \underbrace{\mu_0 \varepsilon_0}_{\frac{1}{c^2}} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

c – Lichtgeschwindigkeit

Diese Gleichungen kann man umformen zu

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

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

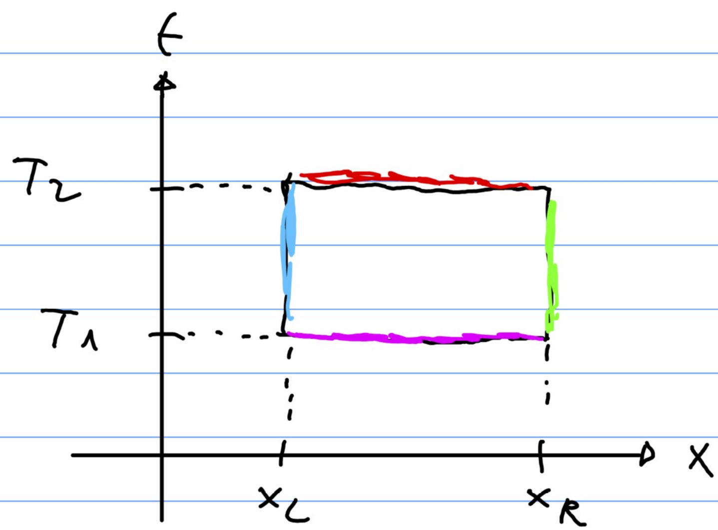
Die lineare Advektions-Gleichung ist eine sog. Erhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\,\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad \Big|\; \int_{T_1}^{T_2}\int_{x_L}^{x_R} dt\,dx$$

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

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

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



Um die Brauchbarkeit (sprich Stabilität) von solchen (linearen) Differenzen-Gleichungen 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

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

xi Buchstabe   imaginäre Einheit

Damit kann man (lineare) Differenzen Verfahren wie folgt schreiben

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

wobei $G(\xi, \Delta x, \Delta t)$ 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

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

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

Kürzen von $e^{I\varphi i\Delta x}$

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

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

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

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

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

Also instabil!

Bsp.: (7) Stabilität von $(a > 0)$

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

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

kürzen $e^{I\varphi i\Delta x}$

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

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

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

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

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

für Stabilität.

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

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

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

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

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

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

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

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

$$B^{n+1/2}_{z,i,j} = B^{n-1/2}_{z,i,j} - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left[\frac{1}{\varepsilon}\left(D^{n}_{y,i+1/2,j} - D^{n}_{y,i-1/2,j}\right)\right]$$
$$+ \frac{\Delta t}{\Delta y}\left[\frac{1}{\varepsilon}\left(D^{n}_{x,i,j+1/2} - D^{n}_{x,i,j-1/2}\right)\right]$$

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