

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 erhält. Der Verlet-Algorithmus (bis auf kleine Fluktuation) jedoch schon! Es lässt sich zeigen, dass der Verlet-Algorithmus Energie erhält. Dieses Verfahren erhält auch noch weitere Grössen (z.B. Drehimpuls, ...) und ist deshalb sehr populär in Mehr-Körper-Simulationen.

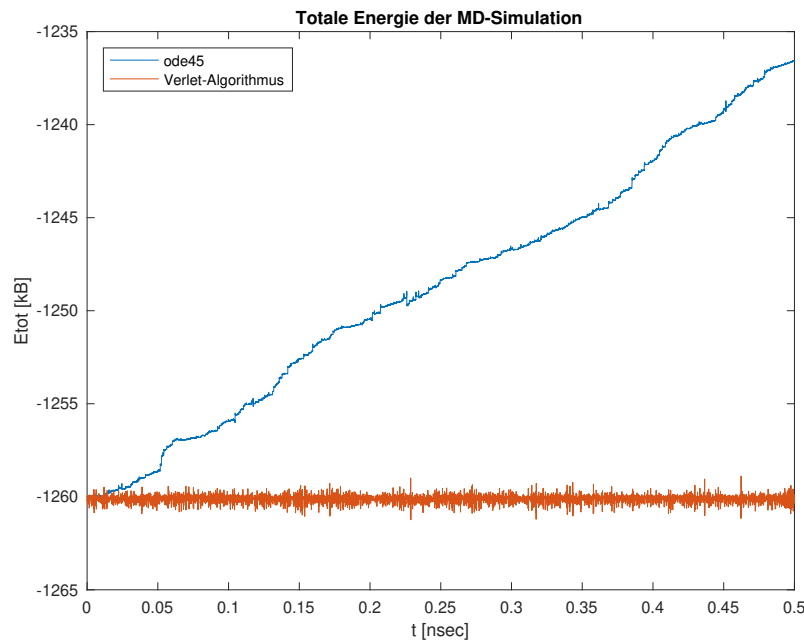


Abbildung 1: Zeitliche Entwicklung der totalen Energie in der MD-Simulation für die beiden Löser.

3. Lineare Advektions-Gleichung

a) Nichts hinzuzufügen.

b) Wie in der Vorlesung (Kapitel 6) beschrieben, entwickelt die von Neumann Stabilitätsanalyse die numerische Lösung in Fourier-Moden (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 Stabilitätsanalyse liefert

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

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 Stabilitätsanalyse liefert

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

Siehe nächstes Blatt!

Also ist der Verstärkungsfaktor

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

und dessen Betrag ist

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

Da stets gilt

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

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 Verfahren in diesem Intervall stabil. Dies bestätigt die in **b**) beobachtete Instabilität dieses Verfahrens.

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