Master - Arbeit

Title of Master Thesis

vorgelegt von

David Symhoven

an der

Fachbereich Physik
Lehrstuhl für Plasma and Computational Physics

Gutachter:

Prof.Dr.Hartmut Ruhl

München, 2017

Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig verfasst zu haben und keine anderen als die in der Arbeit angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

München, Datum der Abgabe

München, 31.03.2017, David Symhoven

Abstract:
Blah Blah Blah Mr. Freeman

Symbole und Konstanten

Plank'sches Wirkungsquantum	h	$6.62606957(29) \cdot 10^{-34}$ J s
Plank'sches Wirkungsquantum	$\hbar$	$1.054571726(47) \cdot 10^{-34}$ J s
Boltzmann - Konstante	k_B	$1.3806488(13) \cdot 10^{-23}$ J K^{-1}
Avogadro - Konstante	N_A	$6.02214129(27) \cdot 10^{23}$ mol^{-1}
Permitivität des Vakuums	ϵ_0	$8.85418781762 \cdot 10^{-12}$ A s V^{-1} m^{-1}
atomare Masseneinheit	u	$1.660538921(73) \cdot 10^{-27}$ kg
Elektronenvolt	eV	$1.602176565(35) \cdot 10^{-19}$ J
1 Angström	Å	10^{-10} m
1 Nanosekunde	ns	10^{-9} s
1 Pikosekunde	ps	10^{-12} s
1 Femtosekunde	fs	10^{-15} s
Ort	$\vec{r}$	[m]
Geschwindigkeit	$\vec{v}$	[m s^{-1}]
Beschleunigung	$\vec{a}$	[m s^{-2}]
Impuls	$\vec{p}$	[kg m s^{-1}]
Kraft	$\vec{F}$	[N]
Masse	m	[kg]
Energie	E	[J]
Temperatur	T	[K]
Druck	p	[N m^{-2}]
Entropie	S	[J K^{-1}]
Potential	V	nicht eindeutig
chemisches Potential	μ	nicht eindeutig
Zeit	t	[s]
diskretisierte Zeit	Δt	[s]
Frequenz	ω	[s^{-1}]
Gesamtteilchenanzahl	N	
Anzahl der Freiheitsgerade	f	
Nabla - Operator	∇	$\left(\frac{\partial}{\partial r_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial r_n}\right)$
Laplace - Operator	Δ	$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$
Hamilton - Operator	$\mathcal{H}$	$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$
Lagrange - Funktion	$\mathcal{L}$	$\mathcal{L} = T - V$

Contents

1

Introduction

Now it's going loose ...[1]

2

Fundamentals

2.1 Liénard-Wiechert Potentials

2.2 Numerics

The following section deals with the numeric aspects of this thesis. We explain the underlying equation of motions and their history. After that, we go into several methods with which we can solve differential equations. Over the course of the last decades numerous methods were invented each of which has its own strength and weaknesses. Some of them are very easy to implement, which in turn usually leads to unprecise results. Others are quite complicated and sophisticated to implement, but very accurate. Therefore one should always consider which method is best for the problem and what it is one want to to achieve.
Following this, we also want to define and calculate the numerical complexity of some chosen algorithms.

2.2.1 euqations of motion

As we know from mechanics the dynamic of a particle is determined by the forces acting on it. In our case there is a force due to electro-magnetic fields. That can be external fields, but also fields due to moving particles, as we explained in section 2.1.
The dynamics of our system is described by the *Lorentz-Newton* equation

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau} &= u^\mu \\ \frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} &= F^\mu_{\ \nu}\, u^\nu + g^\mu, \end{aligned} \tag{2.1}$$

which derivation is quite longish, why we want to refer to literature.
The term $F^\mu_{\ \nu}$ describes the electromagnetic field strength tensor

$$F^\mu_{\ \nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ E_x & 0 & B_z & -B_y \\ E_y & -B_z & 0 & B_x \\ E_z & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.2}$$

The damping term g^μ considers the fact that charged particles radiate fields when they are moving which leads to a loss in their kinetic energy. Within the context of classical electrodynamics Max *Abraham* and Hendrick *Lorentz* discussed radiation damping in their same-named equation first. In 1938 *Dirac* generalized the equation whilst taking special relativity into account.
We now want to deal with how to solve the Lorentz-Newton equation (2.1) numerically.

2.2.2 Euler-Method

The most simple method is the explicit *Euler*-Method. It's easy to implement but not very accurate, as we shall see later. But before we go into the details of the explicit Euler-scheme we need to address some prerequisites all following methods will have in common. Starting point will always be a first oder system of the kind

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau} &= u^\mu \\ \frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} &= f^\mu(x^\nu, u^\nu) \\ x^\mu(\tau_0) &= x_0^\mu \\ u^\mu(\tau_0) &= u_0^\mu.\end{aligned} \tag{2.3}$$

Systems of higher order can always be reduced to a first order system.
In order to solve the equation of motion numerically the domain needs to be discretized. Therefore we divide the time interval into N equidistant partial intervals h, such that

$$h \coloneqq \Delta\tau = \tau_{i+1} - \tau_i$$

holds. The idea is to calculate each point along the trajectory $x_i^\mu = x^\mu(\tau_i)$ iteratively, starting from the initial values x_0^μ and u_0^μ. But to calculate these points all differential operators in (2.3) need to be discretized as well. That is where all methods differ. Each method has its own way to discretize the differential operators.
The basis of the Euler-scheme is a first order Taylor expansion of the integration variable x^μ in τ around τ_i

$$x^\mu(\tau_{i+1}) = x^\mu(\tau_i) + \left.\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau}\right|_{\tau=\tau_i} \underbrace{(\tau_{i+1} - \tau_i)}_{=h} + \mathcal{O}(h^2). \tag{2.4}$$

Analogously for u^μ and solving for $\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau}$ and $\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau}$ respectively yields

$$\begin{aligned}\frac{x_{i+1}^\mu - x_i^\mu}{h} &= u_i^\mu \\ \frac{u_{i+1}^\mu - u_i^\mu}{h} &= f^\mu(x_i^\nu, u_i^\nu).\end{aligned} \tag{2.5}$$

This way of discretizing allows a very easy calculation of x_i^μ according to

$$\begin{aligned}x_{i+1}^\mu &= x_i^\mu + h\ u_i^\mu \\ u_{i+1}^\mu &= u_i^\mu + h\ f^\mu(x_i^\nu, u_i^\nu).\end{aligned} \tag{2.6}$$

In order for us to calculate the goodness of this approximation we need to introduce the *Procedural Error* and the *Order of Consistency*.[2]

2.2.2.1 Procedural Error and Order of Consistency

Definition 2.2.1 (Procedural Error and Order of Consistency) *Let $I \subseteq \mathbb{R}$ be a interval, $f : I \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$, $y : I \to \mathbb{R}^d$ a solution of the initial value problem*

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} y(\tau) &= f(\tau, y(\tau)), \\ y(\tau_0) &= y_0.\end{aligned} \tag{2.7}$$

(a) *The term*

$$\eta(\tau, h) \coloneqq y(\tau) + hf(\tau, y(\tau)) - y(\tau + h) \quad \textit{für } \tau \in I,\ 0 < h \le b - \tau \tag{2.8}$$

is called local Procedural Error of the one-step scheme at τ for the increment h.

(b) *The one-step scheme has an Order of Consistency $p \geq 1$, if the local Procedural Error fulfils*

$$||\eta(\tau, h)|| \leq Ch^{p+1} \quad \textit{für } \tau \in I,\ 0 < h \leq b - \tau, \tag{2.9}$$

with a constant $C \geq 0$, which is independent of τ and h.

Anschaulich ist der Procedural Error die Differenz zwischen der exakten Lösung $y(\tau + h)$ und dem Ergebnis, das man durch das one-step scheme erhält, wenn man von der exakten Lösung zum früheren Zeitpunkt $y(\tau)$ startet. Abbildung 2.1 veranschaulicht die Situation.

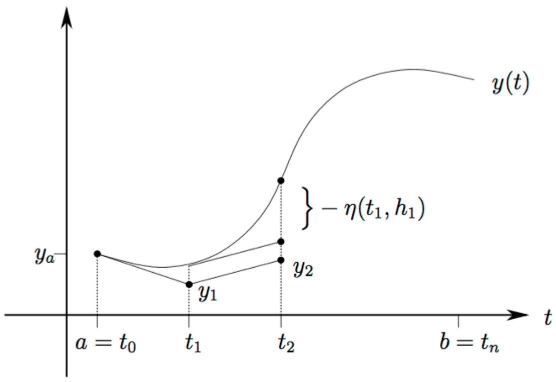

Figure 2.1: Veranschaulichung des Procedural Errors eines one-step schemes. [2]

Wir wollen nun die Definitionen anwenden, um die Order of Consistency des Euler-Verfahrens zu bestimmen.
Ausgangspunkt ist das System (2.1). Dabei konzentrieren wir uns nur auf die Gleichung für u^μ, da x^μ einfach aus u^μ integriert werden kann. Nach Definition 2.2.1 gilt für unser System

$$y = u^\mu. \tag{2.10}$$

Wir erhalten

$$\eta(\tau, h) = u^\mu(\tau_i) + hf^\mu(x^\nu, u^\nu) - u^\mu(\tau_{i+1}). \tag{2.11}$$

Den letzten Term berechnen wir mithilfe einer Taylorentwicklung analog zu (2.4)

$$u^\mu(\tau_{i+1}) = u^\mu(\tau_i) + h\, \frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau}\Big|_{s=\tau_i} + h^2\, \frac{\mathrm{d}^2u^\mu}{\mathrm{d}\tau^2}\Big|_{s=\tau_i}. \tag{2.12}$$

Einsetzen von (2.12) in (2.11) liefert

$$\begin{aligned}
\eta(\tau, h) &= u^\mu(\tau_i) + h\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} - u^\mu(\tau_{i+1}) \\
\eta(\tau, h) &= u^\mu(\tau_i) + h\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} - u^\mu(\tau_i) - h\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} - h^2\frac{\mathrm{d}^2u^\mu}{\mathrm{d}\tau^2} \\
\eta(\tau, h) &= \frac{\mathrm{d}^2u^\mu}{\mathrm{d}\tau^2}\, h^2,
\end{aligned} \tag{2.13}$$

da $\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} = f^\mu(x^\nu, u^\nu)$ für das Euler-Verfahren gilt. Daraus folgt

$$|\eta(\tau, h)| \leq Ch^2 \quad \text{mit } C := \frac{1}{2} \max_{\tau \in \mathcal{D}(u^\mu)} \left| \frac{\mathrm{d}^2 u^\mu}{\mathrm{d}\tau^2} \right|. \tag{2.14}$$

$\mathcal{D}(u^\mu)$ bezeichnet dabei den Definitionsbereich von u^μ. Das Euler-Verfahren hat also Order of Consistency eins.

2.2.3 Leap-Frog-Verfahren

Ein deutlich besseres Verfahren ist das *Leap-Frog*-Verfahren, das eine Order of Consistency von zwei hat, wie man leicht nachrechnen kann.
Im Vergleich zum expliziten Euler-Verfahren hat diese Methode mehrere Vorteile. Sie ist zum einen zeitlich umkehrbar (reversibel), d.h. man kann von jedem Zeitpunkt aus, zu jedem vorherigen Zeitpunkt zurückkehren und zum anderen ist dieses Verfahren *symplektisch*, d.h. es erhält das Phasenraumvolumen, woraus Energie - und Impulserhaltung folgt.
Ein Nachteil des Verfahrens ist jedoch, dass es sich nur gut für Systeme eignet, bei denen die Kraft lediglich vom aktuellen Ort, nicht aber von der Geschwindigkeit des Teilchens abhängt, da es sich sonst um eine implizite Gleichung handeln würde, die sich nur deutlich rechenaufwändiger lösen ließe.
Die zu lösende Differentialgleichung sollte also von folgender Gestalt sein

$$\frac{\mathrm{d}^2 x^\mu}{\mathrm{d}\tau^2} = \frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} = f^\mu(x^\nu). \tag{2.15}$$

Wie vorhin erwähnt unterscheiden sich die verschiedenen Verfahren durch die Art und Weise der Diskretisierung der Differentialoperatoren. Beim Leap-Frog-Verfahren wählt man

$$\begin{aligned} \frac{x^\mu_{i+1} - x^\mu_i}{h} &= u^\mu_{i+\frac{1}{2}} \\ \frac{u^\mu_{i+\frac{1}{2}} - u^\mu_{i-\frac{1}{2}}}{h} &= f^\mu(x^\nu_i). \end{aligned} \tag{2.16}$$

Auflösen nach dem neuen Zeitschritt ergibt dann

$$\begin{aligned} x^\mu_{i+1} &= x^\mu_i + h u^\mu_{i+\frac{1}{2}} \\ u^\mu_{i+\frac{1}{2}} &= u^\mu_{i-\frac{1}{2}} + h f^\mu(x^\nu_i). \end{aligned} \tag{2.17}$$

Wie man sieht, werden Ort und Geschwindigkeit zu unterschiedlichen Zeitpunkten berechnet. Sie sind zeitlich um $h = \frac{1}{2}$ gegeneinander versetzt.

2.2.4 Boris-Pusher

2.2.5 Vay-Pusher

2.2.6 Interpolation der Trajektorien

Die vorangegangenen vorgestellten Verfahren berechnen die Teilchentrajektorien nur an diskreten Stellen $x^\mu_i(\tau)$. Um die Liénard-Wiechert Felder nach Gleichung (**??**) an einem Beobachtungspunkt zu berechnen, wird jedoch der Schnittpunkt der Trajektorie mit dem Rückwärtslichtkegel des jeweiligen Beobachtungspunktes benötigt. Da in den meisten Fällen die berechneten Punkte der Trajektorie nicht direkt auf dem Lichtkegel liegen werden, benötigen wir ein Verfahren, um den genauen Schnittpunkt zu berechnen.
Die einfachste Lösung ist eine lineare Interpolation zwischen dem letzten Punkt außerhalb und des ersten Punktes innerhalb des Lichtkegels. Bild **??** veranschaulicht die Situation.

Sei dazu $x_j^\mu \in \mathbb{R}^{3+1}$ der letzte Punkt außerhalb und $x_{j+1}^\mu \in \mathbb{R}^{3+1}$ der erste Punkt innerhalb des Lichtkegels. Ferner sei $x_c^\mu \in \mathbb{R}^{3+1}$ der gesuchte Schnittpunkt, dann gilt:

$$x_c^\mu = x_j^\mu + \lambda \left(x_{j+1}^\mu - x_j^\mu \right), \tag{2.18}$$

wobei $\lambda \in [0,1]$. Aufgrund der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes, muss der Punkt x_c^μ Bedingung (**??**) erfüllen

$$|\vec{x}_o(t) - \vec{x}_c(t_{ret})| = c\ (t - t_{ret}) \Longleftrightarrow (x_o - x_c)_\mu (x_o - x_c)^\mu = 0. \tag{2.19}$$

Dabei bezeichnet $x_o^\mu \in \mathbb{R}^{3+1}$ den Beobachtungspunkt, an dem die Felder berechnet werden sollen. Zu beachten ist, dass auf der linken Seite des Äquivalenzzeichens ausschließlich die räumlichen Komponenten der respektiven Vierervektoren stehen.
Einsetzen von (2.18) in (2.19) liefert

$$\lambda^2 (x_{j+1} - x_j)_\mu (x_{j+1} - x_j)^\mu + \lambda\ 2(x_{j+1} - x_j)_\mu (x_j - x_o)^\mu + (x_j)_\mu (x_j)^\mu + (x_o)_\mu (x_o)^\mu - 2(x_j)_\mu (x_o)^\mu = 0 \tag{2.20}$$

Wir definieren

$$\begin{aligned} a &:= (x_{j+1} - x_j)_\mu (x_{j+1} - x_j)^\mu \\ b &:= 2(x_{j+1} - x_j)_\mu (x_j - x_o)^\mu \\ c &:= (x_j)_\mu (x_j)^\mu + (x_o)_\mu (x_o)^\mu - 2(x_j)_\mu (x_o)^\mu. \end{aligned}$$

Die quadratische Gleichung (2.20) in λ hat im allgemeinen zwei Lösungen

$$\lambda_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Eine Lösung beschreibt den Schnittpunkt mit dem Rückwärtslichtkegel, die andere den mit dem Vorwärtslichtkegel. Da $\lambda \in [0,1]$, interessieren wir uns nur für die größere der beiden Lösungen

$$\lambda_{1/2} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Einsetzen von λ in (2.18) liefert den gewünschten Schnittpunkt.

2.3 Hybride Felder

2.3.1 Maxwell-Gleichungen

2.3.2 Maxwell-Solver

2.3.3 Nah-und Fernfelder

List of Figures

Bibliography

[1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, New York, NY, USA, 1989.

[2] Christian Kanzow. *Numerische Mathematik II*. 2005. [Online; accessed 13-Oktober-2016].