

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	$h$	$6.62606957(29) \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Plank'sches Wirkungsquantum	$\hbar$	$1.054571726(47) \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Boltzmann - Konstante	$k_B$	$1.3806488(13) \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Avogadro - Konstante	$N_A$	$6.02214129(27) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Permittivität des Vakuums	$\epsilon_0$	$8.85418781762 \cdot 10^{-12} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}^{-1}$
atomare Masseneinheit	$u$	$1.660538921(73) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Elektronenvolt	$\text{eV}$	$1.602176565(35) \cdot 10^{-19} \text{ J}$
1 Angström	$\text{\AA}$	$10^{-10} \text{ m}$
1 Nanosekunde	$\text{ns}$	$10^{-9} \text{ s}$
1 Pikosekunde	$\text{ps}$	$10^{-12} \text{ s}$
1 Femtosekunde	$\text{fs}$	$10^{-15} \text{ s}$
Ort	$\vec{r}$	$[\text{m}]$
Geschwindigkeit	$\vec{v}$	$[\text{m s}^{-1}]$
Beschleunigung	$\vec{a}$	$[\text{m s}^{-2}]$
Impuls	$\vec{p}$	$[\text{kg m s}^{-1}]$
Kraft	$\vec{F}$	$[\text{N}]$
Masse	$m$	$[\text{kg}]$
Energie	$E$	$[\text{J}]$
Temperatur	$T$	$[\text{K}]$
Druck	$p$	$[\text{N m}^{-2}]$
Entropie	$S$	$[\text{J K}^{-1}]$
Potential	$V$	nicht eindeutig
chemisches Potential	$\mu$	nicht eindeutig
Zeit	$t$	$[\text{s}]$
diskretisierte Zeit	$\Delta t$	$[\text{s}]$
Frequenz	$\omega$	$[\text{s}^{-1}]$
Gesamtteilchenanzahl	$N$	
Anzahl der Freiheitsgerade	$f$	
Nabla - Operator	$\nabla$	$\left( \frac{\partial}{\partial r_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial r_n} \right)$
Laplace - Operator	$\Delta$	$\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$
Hamilton - Operator	$\mathcal{H}$	$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$
Lagrange - Funktion	$\mathcal{L}$	$\mathcal{L} = T - V$

---

# Inhaltsverzeichnis

---

<b>Deklaration</b>	<b>ii</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Liénard-Wiechert Potentiale . . . . .	3
2.2 Numerik . . . . .	3
2.2.1 Bewegungsgleichung . . . . .	3
2.2.2 Euler-Verfahren . . . . .	3
2.2.3 Leap-Frog-Verfahren . . . . .	6
2.2.4 Boris-Pusher . . . . .	6
2.2.5 Vay-Pusher . . . . .	6
2.3 Hybride Felder . . . . .	6
2.3.1 Maxwell-Gleichungen . . . . .	6
2.3.2 Maxwell-Solver . . . . .	6
2.3.3 Nah-und Fernfelder . . . . .	6
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>8</b>

---

## Einleitung

---

Now it's going loose ...<sup>[1]</sup>

---

## Grundlagen

---

### 2.1 Liénard-Wiechert Potentiale

### 2.2 Numerik

Der folgende Abschnitt beschäftigt sich mit dem numerischen Aspekt der Arbeit. Wir stellen die zugrunde liegende Bewegungsgleichung und deren Historie vor. Anschließend gehen wir auf diverse Methoden ein, mit Hilfe derer sich Differentialgleichungen lösen lassen. Über die vergangenen Jahre wurden unzählige Verfahren entwickelt, wobei jedes seine Stärken und Schwächen hat. Deshalb sollte zunächst immer wohl überlegt sein, was erreicht werden soll. Einige Methoden sind sehr einfach, dafür unpräzise, andere sind sehr aufwändig zu implementieren, dafür sehr genau. Eine Methode für alle Probleme gibt es leider nicht.

Im Anschluss wollen wir dann noch die numerische Komplexität ausgewählter Algorithmen definieren und berechnen.

#### 2.2.1 Bewegungsgleichung

Wie aus der Mechanik bekannt, ist die Dynamik eines Teilchens durch die auf ihn wirkenden Kräfte vorgeschrieben. In unserem Fall wirkt eine Kraft aufgrund von elektrischen und magnetischen Feldern. Dies können zum einen externe Felder, aber auch Felder sein, die durch die Bewegung anderer Teilchen entstehen, wie wir im Abschnitt 2.1 bereits gesehen haben.

Unsere Systemdynamik wird durch die *Lorentz-Newton* Gleichung beschrieben

$$\begin{aligned}\frac{dx^\mu}{d\tau} &= u^\mu \\ \frac{du^\mu}{d\tau} &= F^\mu{}_\nu u^\nu + g^\mu,\end{aligned}\tag{2.1}$$

deren Herleitung länglich ist und wir deshalb auf Literatur verweisen möchten. Der Term  $F^\mu{}_\nu$  beschreibt den elektromagnetischen Feldstärketensor

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

Der Dämpfungsterm  $g^\mu$  berücksichtigt den Fakt, dass bewegte Ladungen Felder abstrahlen und dadurch kinetische Energie verlieren. Die Strahlungsdämpfung wurde erstmals durch Max Abraham und Hendrick Lorentz in ihrer gleichnamigen Gleichung im Rahmen der klassischen Elektrodynamik behandelt. 1938 verallgemeinerte Dirac dann die Gleichung, unter Berücksichtigung der Relativitätstheorie. Wir wollen uns nun damit beschäftigen, wie wir die Bewegungsgleichung (2.1) numerisch integrieren können.

#### 2.2.2 Euler-Verfahren

Das wohl einfachste aller Verfahren ist das explizite *Euler*-Verfahren. Es ist sehr schnell zu implementieren, aber auch sehr unpräzise, wie wir in Kürze sehen werden. Bevor wir uns aber

mit den Details des expliziten Euler-Verfahrens beschäftigen, müssen wir über die Voraussetzungen sprechen, die alle Verfahren gemeinsam haben. Ausgangspunkt ist immer ein System erster Ordnung der Form

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

Systeme höherer Ordnung können immer auf ein System erster Ordnung reduziert werden. Um die Bewegungsgleichung numerisch lösen zu können, muss der Definitionsraum diskretisiert werden. Dazu wird das Zeitintervall in  $N$  äquidistante Teilintervalle  $h$  zerlegt, sodass

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

gilt. Die Idee ist nun, dass man ausgehend von den Startwerten  $x_0^\mu$  und  $u_0^\mu$ , iterativ jeden weiteren Punkt der Trajektorie  $x_i^\mu = x^\mu(\tau_i)$  berechnet. Um diese Punkte berechnen zu können, müssen allerdings auch die Differentialoperatoren in (2.3) diskretisiert werden. Darin unterscheiden sich nun die Verfahren. Grundlage des Euler-Verfahrens bildet eine Taylorentwicklung erster Ordnung der Integrationsvariablen  $x^\mu$  in der Variable  $\tau$  um den Zeitpunkt  $\tau_i$

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

Analoges Vorgehen für  $u^\mu$  und auflösen nach  $\frac{dx^\mu}{d\tau}$  bzw.  $\frac{du^\mu}{d\tau}$  liefert schließlich

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

Diese Art der Diskretisierung ermöglicht eine sehr einfache Berechnung der Punkte  $x_i^\mu$  gemäß

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

Um nun die Güte dieser Approximation zu bestimmen, benötigen wir den Begriff des *Verfahrensfehlers* und der *Konsistenzordnung*.<sup>[2]</sup>

### 2.2.2.1 Konsistenz - und Konvergenzordnung

**Definition 2.2.1 (Verfahrensfehler und Konsistenzordnung)** Sei  $I \subseteq \mathbb{R}$  ein Intervall,  $f : I \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ,  $y : I \rightarrow \mathbb{R}^d$  eine Lösung des Anfangswertproblems

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

(a) Die Größe

$$\eta(\tau, h) := y(\tau) + hf(\tau, y(\tau)) - y(\tau + h) \quad \text{für } \tau \in I, \ 0 < h \leq b - \tau\tag{2.8}$$

heißt *lokaler Verfahrensfehler des Einschrittverfahrens im Punkt  $\tau$  zur Schrittweite  $h$* .



(b) Das Einschrittverfahren besitzt die Konsistenzordnung  $p \geq 1$ , wenn für den lokalen Verfahrensfehler die Ungleichung

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

mit einer von  $\tau$  und  $h$  unabhängigen Konstanten  $C \geq 0$  erfüllt ist.

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

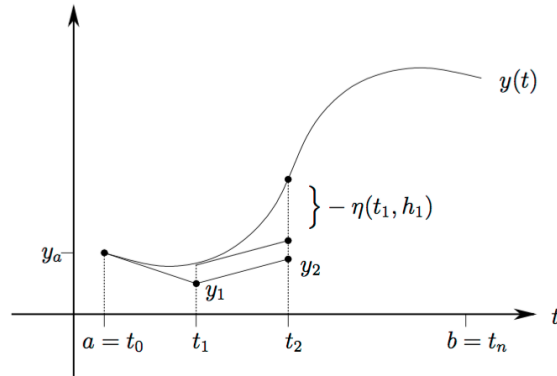


Abbildung 2.1: Veranschaulichung des Verfahrensfehlers eines Einschrittverfahrens. [2]

Wir wollen nun die Definitionen anwenden, um die Konsistenzordnung des Euler-Verfahrens zu bestimmen.

Ausgangspunkt ist das System (2.1). Dabei konzentrieren wir uns nur auf die Gleichung für  $u^\mu$ , da  $x^\mu$  einfach aus  $u^\mu$  integriert werden kann. Nach Definition 2.2.1 gilt für unser System

$$y = u^\mu. \quad (2.10)$$

Wir erhalten

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

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

$$u^\mu(\tau_{i+1}) = u^\mu(\tau_i) + h \left. \frac{du^\mu}{d\tau} \right|_{s=\tau_i} + h^2 \left. \frac{d^2u^\mu}{d\tau^2} \right|_{s=\tau_i}. \quad (2.12)$$

Einsetzen von (2.12) in (2.11) liefert

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

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

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

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

### 2.2.3 Leap-Frog-Verfahren

Ein deutlich besseres Verfahren ist das *Leap-Frog*-Verfahren, das eine Konsistenzordnung 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

$$\frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = \frac{du^\mu}{d\tau} = f^\mu(x^\nu). \quad (2.15)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{x_{i+1}^\mu - x_i^\mu}{h} &= u_{i+\frac{1}{2}}^\mu \\ \frac{u_{i+\frac{1}{2}}^\mu - u_{i-\frac{1}{2}}^\mu}{h} &= f^\mu(x_i^\nu). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Auflösen nach dem neuen Zeitschritt ergibt dann

$$\begin{aligned} x_{i+1}^\mu &= x_i^\mu + h u_{i+\frac{1}{2}}^\mu \\ u_{i+\frac{1}{2}}^\mu &= u_{i-\frac{1}{2}}^\mu + h f^\mu(x_i^\nu). \end{aligned} \quad (2.17)$$

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

## 2.3 Hybride Felder

### 2.3.1 Maxwell-Gleichungen

### 2.3.2 Maxwell-Solver

### 2.3.3 Nah-und Fernfelder

---

## Abbildungsverzeichnis

---

2.1	Verfahrensfehler . . . . .	5
-----	----------------------------	---

---

## Literaturverzeichnis

---

- [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].