



TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

---

Fakultät für Naturwissenschaften

Theorie ungeordneter Systeme

# Mitschrift

Computational Science Strukturen und Methoden

Erik Lorenz

Chemnitz, den 17. August 2013

**Vorlesender:** Prof. Dr. Michael Schreiber

**Übungsleiter:** Dr. Philipp Cain

**Lorenz, Erik**

Computational Science Strukturen und Methoden

Mitschrift, Fakultät für Naturwissenschaften

Technische Universität Chemnitz, August 2013

### **Hinweis**

Dies ist eine halbautomatische Übertragung aus einem proprietären Notationsformat. Es gibt keine Garantie für korrekte Formatierung von Formeln und Übersichten. Unter Umständen kann es zu doppelter Nummerierung der Kapitel kommen.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Herausforderungen . . . . .	1
1.2	Computer-Experiment . . . . .	1
1.3	Inhalte aus erstem Buchkapitel . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Einfache Beispiele</b>	<b>3</b>
2.1	Freier Fall . . . . .	3
2.1.1	Physikalischer Hintergrund . . . . .	3
2.1.2	Modell . . . . .	3
2.1.3	Algorithmus . . . . .	3
2.2	Programmierung . . . . .	4
2.2.1	Anwendungen in OSP bzw. Buch . . . . .	4
2.3	Harmonischer Oszillator . . . . .	4
2.3.1	Physikalischer Hintergrund . . . . .	4
2.3.2	Modell . . . . .	4
2.3.3	Algorithmus . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Allgemeine numerische Lösungen der Newtonschen Bewegungsgleichungen</b>	<b>6</b>
3.1	Lösungsverfahren . . . . .	6
3.1.1	Euler-Algorithmus . . . . .	6
3.1.2	Euler-Cromer-Algorithmus . . . . .	6
3.1.3	Taylor-Entwicklung in $\Delta_t$ . . . . .	6
3.1.4	Mittelpunkt-Algorithmus . . . . .	7
3.1.5	Halbschritt-Algorithmus . . . . .	7
3.1.6	Euler-Richardson-Algorithmus . . . . .	7
3.1.7	Verlet-Algorithmus (Leap-Frog) . . . . .	8
3.1.8	Velocity-Verlet-Algorithmus . . . . .	8
3.1.9	Runge-Kutta-Algorithmus . . . . .	8
3.1.10	Adaptive Algorithmen . . . . .	9
3.1.11	Richardson-Extrapolation . . . . .	9
3.1.12	Prädiktor-Korrektor-Verfahren . . . . .	9
3.2	Hamiltonsche Bewegungsgleichungen . . . . .	10
3.3	Orts- und geschwindigkeitsabhängige Kräfte . . . . .	11
3.3.1	Teilchen im Schwerkraftfeld . . . . .	11
3.3.2	Reibung und Luftwiderstand . . . . .	11
3.3.3	2D-Bewegung mit Reibung . . . . .	12
3.3.4	ODE-Interface . . . . .	12

3.4	Zerfallsprozesse . . . . .	13
3.5	Rotierender Ball . . . . .	13
3.5.1	Magnus-Effekt . . . . .	13
3.6	Bewegung im Elektromagnetischen Feld . . . . .	14
3.7	Bewegung eines Regentropfens . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Schwingungen</b>	<b>16</b>
4.1	Feder rückstellende Kraft . . . . .	16
4.1.1	Harmonischer Oszillator . . . . .	16
4.2	Pendel . . . . .	16
4.2.1	Konservative Systeme . . . . .	17
4.3	gedämpfter harmonischer Oszillator . . . . .	17
4.4	äußere Kräfte . . . . .	17
4.4.1	$F(t) = mA_0 \cos \omega t$ . . . . .	17
4.4.2	Kraftstoß (oftmals periodisch) . . . . .	18
4.5	Elektrische Schwingkreise . . . . .	18
4.5.1	Kirchhoff'sche Gesetze . . . . .	18
4.5.2	Korrespondenz . . . . .	19
4.6	Chemische Oszillationen . . . . .	20
4.7	Nerven einer Krabbe . . . . .	20
<b>5</b>	<b>Mehrkörperprobleme</b>	<b>21</b>
5.1	Planetenbewegungen . . . . .	21
5.2	Bewegungsgleichungen . . . . .	21
5.3	Kreisbahnen . . . . .	22
5.4	Astronomische Einheiten . . . . .	22
5.5	Kepler's 3. Gesetz . . . . .	22
5.5.1	Linearer Fit . . . . .	22
5.6	Simulation der Erdbahn . . . . .	23
5.7	v-Darstellung . . . . .	23
5.8	Dreikörperproblem . . . . .	23
5.8.1	andere Kräfte . . . . .	23
5.8.2	analytische Lösungen des 3-Körper-Problemes . . . . .	24
5.8.3	Beschreibung des Heliumatomes auf klassische Weise . . . . .	24
5.9	Zwei-Körper-Streuung . . . . .	24
5.9.1	differentieller Streuquerschnitt . . . . .	25
5.9.2	Beispiel . . . . .	25
5.9.3	Anwendung . . . . .	25
5.9.4	Rutherfordstreuung . . . . .	26
5.9.5	abgeschirmtes Coulomb-Potential . . . . .	26
<b>6</b>	<b>Chaotische Bewegung</b>	<b>27</b>
6.1	Logistische Abbildung . . . . .	27
6.1.1	Analyse eines chaotischen Verhaltens . . . . .	29

6.2	Universelle Eigenschaften . . . . .	29
6.2.1	Feigenbaumkonstante . . . . .	29
6.2.2	Symmetrie um $x = \frac{1}{2}$ . . . . .	29
6.2.3	Abstände der Fixpunkte von $\frac{1}{2}$ . . . . .	30
6.2.4	Abstände der Bifurkationspunkte . . . . .	30
6.2.5	andere Abbildungen . . . . .	30
6.3	Quantitative Beschreibung des Chaos . . . . .	31
6.4	Kontrolle des Chaos . . . . .	32
6.5	Nullstellen von $g(x) = f(x) - x$ . . . . .	33
6.5.1	Bisektion . . . . .	33
6.5.2	Tangentenverfahren von Newton / Newton-Raphson . . . . .	33
6.5.3	Sekantenverfahren . . . . .	34
6.5.4	Regula falsa . . . . .	34
6.5.5	Quadratische Interpolation . . . . .	34
6.5.6	mehrdimensionale Probleme . . . . .	34
6.6	Billiards . . . . .	35
6.7	Mehrdimensionale Modelle . . . . .	35
6.8	Pendel mit Dämpfung und oszillierender Kraft . . . . .	36
6.8.1	Kreis-Abbildung . . . . .	37
6.9	Hamilton'sches Chaos . . . . .	38
6.9.1	Standardabbildung . . . . .	39
<b>7</b>	<b>Zufallsprozesse</b>	<b>40</b>
7.1	Zufallszahlenfolgen . . . . .	40
7.1.1	Linear Congruential Method (LCM) . . . . .	40
7.1.2	Generalized Feedback Shift Register Method . . . . .	41
7.1.3	Weitere Methoden . . . . .	41
7.1.4	Tests . . . . .	42
7.2	Monte-Carlo-Algorithmus . . . . .	43
7.2.1	Fluktuationen . . . . .	44
7.3	Zufallspfade (Random Walk) . . . . .	44
7.3.1	Varianten des Zufallspfades . . . . .	47
7.4	Verteilungen . . . . .	48
7.4.1	Zentraler Grenzwertsatz . . . . .	48
7.4.2	Gesetz der großen Zahlen . . . . .	49
7.4.3	Poisson-Verteilung . . . . .	49
7.5	Methode der kleinsten Quadrate . . . . .	50
7.5.1	Bewertungsmöglichkeiten der Fits . . . . .	51
7.6	Chemische Reaktionen . . . . .	52
7.7	Variationsmethoden . . . . .	53
7.7.1	Fermat'sches Prinzip . . . . .	53
7.7.2	Prinzip der kleinsten Wirkung . . . . .	53
7.8	Polymere . . . . .	53

<b>8</b>	<b>Dynamik von Vielteilchensystemen</b>	<b>55</b>
8.1	Intermolekulare Potentiale . . . . .	55
8.2	Numerischer Algorithmus . . . . .	55
8.3	MD-Programm . . . . .	56
8.3.1	Tests . . . . .	56
8.4	Berechnung der Mittelwerte . . . . .	57
8.4.1	Temperatur $T$ . . . . .	57
8.4.2	Druck $P$ . . . . .	57
8.4.3	spezifische Wärme . . . . .	57
8.4.4	Startgitterwahl . . . . .	58
8.4.5	Radiale Paarverteilungsfunktion . . . . .	58
8.5	Harte Kugeln . . . . .	59
8.6	dynamische Eigenschaften . . . . .	61
8.7	Nachbarschaft . . . . .	62
8.8	Ergänzungen . . . . .	63
8.8.1	Heisenberg-Modell . . . . .	63
8.8.2	ergodisches Verhalten . . . . .	63
8.8.3	Molekulardynamik für konstante Temperaturen . . . . .	64
8.8.4	Molekulardynamik auf der Kugelschale . . . . .	65
<b>9</b>	<b>Normalschwingungen und Wellen</b>	<b>66</b>
9.1	gekoppelte Oszillatoren . . . . .	66
9.2	numerische Lösungen, z.B. für nichtlineare Kräfte . . . . .	67
9.3	Fourierreihen . . . . .	68
9.3.1	FFT . . . . .	70
9.3.2	Wrap-Around-Ordnung . . . . .	70
9.4	Fouriertransformation in $d=2$ . . . . .	71
9.5	Fourier-Integrale für nichtperiodische Funktionen . . . . .	71
9.6	Leistungsspektrum . . . . .	71
9.6.1	FPU-Problem . . . . .	72
9.7	laufende Wellen . . . . .	72
9.7.1	FFT-Rechenregeln . . . . .	73
9.8	Interferenz . . . . .	73
9.9	Fraunhofer-Beugung . . . . .	74
9.10	Fresnel-Beugung . . . . .	75
<b>10</b>	<b>Elektrodynamik</b>	<b>76</b>
10.1	Statische Ladungen . . . . .	76
10.2	Elektrisches Potential . . . . .	77
10.3	Randwertprobleme . . . . .	77
10.3.1	triviale Relaxationsmethode . . . . .	77
10.3.2	Jacobi-Relaxation . . . . .	78
10.3.3	Gauß-Seidel-Relaxation . . . . .	78
10.3.4	Überrelaxation . . . . .	78



10.3.5	Mehrgitterverfahren . . . . .	78
10.4	Lösung von $\nabla^2 = 0$ mit Zufallspfad . . . . .	79
10.5	Bewegte Ladungen . . . . .	80
10.6	Maxwell-Gleichungen . . . . .	81
<b>11</b>	<b>Integration</b>	<b>84</b>
11.1	klassische Methoden in 1 Dimension . . . . .	84
11.1.1	Rechtecknäherung . . . . .	84
11.1.2	Trapeznäherung . . . . .	84
11.1.3	parabolische Näherung . . . . .	85
11.1.4	Einschub (Anhang D im Buch): Polynome und deren Benutzung zur Integration . . . . .	85
11.1.5	Fitting . . . . .	86
11.2	Monte-Carlo-Integration . . . . .	86
11.3	Höherdimensionale Integrale . . . . .	87
11.4	Fehleranalyse für Monte-Carlo-Verfahren . . . . .	87
11.5	Wahrscheinlichkeitsverteilungen . . . . .	88
11.5.1	Importance Sampling . . . . .	88
11.5.2	Akzeptanz-Ablehnung . . . . .	89
11.6	Importance Sampling . . . . .	90
11.7	Metropolis-Algorithmus . . . . .	90
<b>12</b>	<b>Perkolation</b>	<b>92</b>
12.0.1	Modell: Platzperkolation . . . . .	92
12.0.2	Alternatives Modell: Kantenperkolation, Bindungsperkolation, bond percolation . . . . .	92
12.1	Perkolationsschwelle $p_c$ . . . . .	92
12.1.1	Duales Gitter . . . . .	93
12.1.2	Kontinuums-Modell . . . . .	93
12.2	Quantitative Analyse . . . . .	94
12.2.1	$P_\infty$ . . . . .	94
12.2.2	$n_s$ . . . . .	94
12.2.3	$w_s$ . . . . .	94
12.2.4	mittlere Clustergröße $S$ . . . . .	94
12.2.5	Konnektivitätslänge $\xi^2$ . . . . .	95
12.3	Newman-Ziff-Algorithmus . . . . .	95
12.4	Kritische Exponenten . . . . .	95
12.4.1	Skalengesetze . . . . .	96
12.4.2	Universalität . . . . .	97
12.5	Renormierungsgruppe . . . . .	97
12.5.1	Renormierungsgruppentransformation . . . . .	97
12.5.2	vertikale oder horizontale Verbindungen . . . . .	99
12.5.3	vertikalen und horizontale Verbindungen . . . . .	99
12.5.4	$b=3$ . . . . .	99

12.5.5	$b = \sqrt{3}$ . . . . .	99
<b>13</b>	<b>Fraktale</b> . . . . .	<b>101</b>
13.1	Fraktale Dimension . . . . .	101
13.2	Exakte Fraktale . . . . .	102
13.2.1	Koch-Kurve . . . . .	102
13.2.2	Box-Counting-Algorithmus . . . . .	103
13.2.3	quadratische Koch-Kurve . . . . .	103
13.2.4	Sierpinski-Dreieck . . . . .	103
13.2.5	Sierpinski-Teppich . . . . .	103
13.2.6	Sierpinski-Schwamm . . . . .	103
13.2.7	Mengerschwamm . . . . .	104
13.3	Fraktales Wachstum . . . . .	104
13.3.1	Eden-Modell (1958) . . . . .	104
13.3.2	Invasions-Perkolation . . . . .	104
13.3.3	Zufallswanderer auf Perkolationscluster . . . . .	104
13.3.4	DLA - Diffusion Limited Aggregation - Diffusionsbegrenztes Wachstum . . . . .	105
13.3.5	Singularitätsspektrum . . . . .	107
13.3.6	Laplace'sches Wachstum . . . . .	108
13.3.7	Laplacesches Wachstum (Algorithmus) . . . . .	108
13.3.8	Oberflächenwachstum . . . . .	109
13.3.9	random deposition methods . . . . .	110
13.4	Fraktale im Chaos . . . . .	111
<b>14</b>	<b>Komplexe Systeme</b> . . . . .	<b>112</b>
14.1	Zelluläre Automaten . . . . .	112
14.1.1	von Neumann & Ulam 1948 . . . . .	112
14.1.2	allgemeiner . . . . .	112
14.1.3	ZA in 2 Dimensionen . . . . .	113
14.1.4	Verkehrsmodelle . . . . .	113
14.1.5	Nagel-Schreckenberg . . . . .	113
14.2	Selbstorganisierte Kritikalität . . . . .	114
14.2.1	Gegenbeispiel Gauß . . . . .	114
14.3	Neuronale Netze . . . . .	116
14.3.1	Hopfield-Modell . . . . .	116
14.4	Wachsende Netze . . . . .	117
14.4.1	Erdős-Reny-Modell . . . . .	117
14.4.2	Small-World-Network . . . . .	117
14.4.3	Barabasi-Albert-Modell . . . . .	118
14.5	Genetische Algorithmen . . . . .	118
14.5.1	Beispiel: Ising-Modell . . . . .	119
14.6	Modelle der Meinungsbildung . . . . .	119
14.6.1	Sznajd-Modell . . . . .	120

14.6.2	Minority Game . . . . .	120
14.7	Gittergasmodelle für inkompressible Flüssigkeiten . . . . .	120
<b>15</b>	<b>Monte-Carlo-Simulationen</b>	<b>122</b>
15.1	Mikrokanonisches Ensemble . . . . .	122
15.1.1	Kanonisches Ensemble . . . . .	123
15.2	Ising-Modell . . . . .	124
15.3	Metropolis-Algorithmus . . . . .	126
15.4	Ising-Modell, Metropolis-Algorithmus . . . . .	128
15.5	Phasenübergang im Ising-Modell . . . . .	129
15.5.1	Ising-Antiferromagnet . . . . .	133
15.6	Ising-ähnliche Modelle . . . . .	135
15.6.1	x-y-Modell . . . . .	135
15.6.2	Heisenberg-Modell . . . . .	135
15.6.3	Ising-Spin-Glas . . . . .	135
15.6.4	Potts-Modell . . . . .	136
15.7	Klassische Flüssigkeiten . . . . .	136
15.7.1	Harte Kugeln . . . . .	136
15.7.2	Lenard-Jones-Potential . . . . .	137
15.8	Datenanalyse am Phasenübergang . . . . .	137
15.8.1	Histogramm-Methode . . . . .	137
15.8.2	Lee & Kasterlitz-Methode . . . . .	138
15.8.3	Binder-Kumulante . . . . .	138
15.9	Kombinatorische Optimierung . . . . .	139
<b>16</b>	<b>Quantensysteme</b>	<b>140</b>
16.1	zeitunabhängige Lösung . . . . .	140
16.2	Zeitabhängige Schrödingergleichung . . . . .	143
16.3	Impulsraum-Darstellung . . . . .	145
16.4	Variationsrechnung . . . . .	146
16.5	Lösung der Schrödingergleichung mit Zufallspfaden . . . . .	148
16.6	Pfadintegrale mit Quanten-Monte-Carlo-Methode . . . . .	150
<b>17</b>	<b>Bewegung starrer Körper</b>	<b>152</b>
17.1	Koordinatentransformationen in 2 Dimensionen . . . . .	152
17.2	Koordinatentransformation in 3 Dimensionen . . . . .	152
17.3	Java APIs für Visualisierung in 3 Dimensionen . . . . .	153
17.4	Dynamik eines starren Körpers im Laborsystem $\mathcal{L}$ . . . . .	154
17.5	Quaternionen . . . . .	155
17.6	Bewegungsgleichungen . . . . .	157
17.7	Kreisel . . . . .	158
<b>18</b>	<b>Relativitätstheorie</b>	<b>160</b>
18.1	spezielle Relativitätstheorie . . . . .	160

## INHALTSVERZEICHNIS

18.2 Allgemeine Relativitätstheorie . . . . .	162
18.3 Dynamik in Polarkoordinaten . . . . .	162
18.4 Schwarzschild-Koordinaten . . . . .	163
18.5 Trajektorien von Teilchen und Licht . . . . .	164
18.6 Sehen $\neq$ Trajektorien in der Schwarzschildabbildung . . . . .	165
18.7 Dynamik . . . . .	165
18.8 Kerr-Metrik . . . . .	165
<b>19 Ergänzungen</b>	<b>167</b>
19.1 Kollektives Verhalten . . . . .	167
19.2 Eingeschränkte Dynamik . . . . .	167

# 1 Einleitung

*zwei wichtige Bücher* Numerical Recipes for C (1992) An Introduction to Computer Simulation Methods (2006)

## 1.1 Herausforderungen

Fehlerquellen

- simple Bugs
- falsche Annahmen
- falsche Datenwerte

*Verifizierung des Modelles*

- Validierung (des Programmes hinsichtlich des Programmes)
- Plausibilitätsprüfungen (des Programmes anhand von Daten) je mehr, desto besser

(in dieser Reihenfolge)

## 1.2 Computer-Experiment

Entwicklungsprozess: Physikalisches System

- Modell (idealisierte Form)
- Algorithmus
- Daten
- Vergleich mit Realität

**Simulationen ersetzen nicht das Denken**

(Geschichten zu Programmiersprachen und FORTRAN/Java im Allgemeinen)

Java Stichwörter

- Encapsulation
- Inheritance
- Polymorphismus/Interfaces

Hinweis: **Erstes Programm nur Programmentwurf**

## 1.3 Inhalte aus erstem Buchkapitel

- Physikalischer Hintergrund
- Modell und Algorithmus
- Probleme (aus Buch), Lösungen, Vergleich mit bekannten Lösungen/Ergebnissen  
Kontrolle von Erhaltungsgrößen Symmetrienerhaltung Ist Ergebnis sinnvoll? statistische Fehler (Konvergenz gegeben und sinnvoll?)
- abgeschlossenes Bild; insgesamt kohärent; schönes Gesamtbild aus Einzelergebnissen bilden
- Varianten durchspielen

## 2 Einfache Beispiele

### 2.1 Freier Fall

#### 2.1.1 Physikalischer Hintergrund

Kugel im Gravitationsfeld ohne Reibung

$$F_g = -m * g$$
$$0 < g = 9.81 m/s^2$$

#### 2.1.2 Modell

Newtonsche Bewegungsgleichung

$$F = m\ddot{y}$$

analytische Lösung möglich:

$$y(t) = y(0) + v(0) * t - \frac{1}{2}gt^2$$
$$v(t) = v(0) - gt$$

$y(0)$ ,  $v(0)$  sind Anfangsbedingungen  
numerischer Ansatz:

$$dy/dt = v(t)$$
$$dv/dt = -g$$

Näherung durch finite Differenzen:

$$\frac{y(t + \Delta_t) - y(t)}{\Delta_t} = v(t)$$
$$\frac{v(t + \Delta_t) - v(t)}{\Delta_t} = -g$$

#### 2.1.3 Algorithmus

Auflösen nach Euler-Algorithmus-verträglichen Variablen

$$v(t + \Delta_t) = v(t) - g\Delta_t$$
$$y(t + \Delta_t) = y(t) + v(t)\Delta_t$$

## 2.2 Programmierung

### 2.2.1 Anwendungen in OSP bzw. Buch

- FirstFallingBallApp
- FallingBallApp
- FallingParticleCalcApp
- FallingParticlePlotApp

## 2.3 Harmonischer Oszillator

### 2.3.1 Physikalischer Hintergrund

$$F = -ky$$

k - Federkonstante

### 2.3.2 Modell

$$\dot{y} = v$$

$$\dot{v} = -\frac{k}{m}y$$

analytische Lösung

$$y(t) = A\cos(\omega_0 t) + B\sin(\omega_0 t)$$

$$A = y(0)$$

$$B = v(0)$$

⇒ erfüllt beide Differentialgleichungen

Allerdings existieren auch andere analytische Lösungen, welche äquivalent und in einander überführbar sind. Dafür ist die Überführbarkeit der trigonometrischen Funktionen verantwortlich.

$$\omega_0^2 = \frac{k}{m}$$

$\omega_0$  - *Eigenfrequenz*



### 2.3.3 Algorithmus

Euler-Algorithmus aus 2.2, welcher allerdings nur bedingt zu empfehlen ist. Eine kleine Änderung hinsichtlich besserer Konvergenz ist notwendig:

Wir vertauschen die Berechnungsreihenfolge: Erst  $v$ , dann  $y \Rightarrow$  Euler-Cromer-Algorithmus

$$\begin{aligned}v(t + \Delta_t) &= v(t) - \frac{k}{m}y(t)\Delta_t \\y(t + \Delta_t) &= y(t) + v(t + \Delta_t)\Delta_t\end{aligned}$$

## 3 Allgemeine numerische Lösungen der Newtonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{y} = v(t)$$
$$\dot{v} = a(t) = \frac{F(t)}{m}$$

### 3.1 Lösungsverfahren

#### 3.1.1 Euler-Algorithmus

Formulierung: s. oben

neues y aus altem v

neues v aus altem y

#### 3.1.2 Euler-Cromer-Algorithmus

Formulierung: s. oben

neues v aus altem y

neues y aus neuem v

Erhaltung der Gesamtenergie (hier: harmonischer Oszillator)

$$E_{tot} = \frac{m}{2}v^2 + \frac{k}{2}y^2$$

Nur für konservative (oftmals auch reversible) Systeme

#### 3.1.3 Taylor-Entwicklung in $\Delta_t$

$$t_n := n\Delta_t$$

$$v_{n+1} = v_n + a_n\Delta_t + \mathcal{O}(\Delta_t^2) \quad (i)$$

$$x_{n+1} = x_n + v_n\Delta_t + \frac{1}{2}a_n\Delta_t^2 + \mathcal{O}(\Delta_t^3) \quad (ii)$$

Euler: ausschließlich  $\mathcal{O}(n)$ -Terme berücksichtigt

$\Rightarrow$  lokaler Fehler  $\mathcal{O}(\Delta_t^2)$

$N = \frac{1}{\Delta_t}$  Schritte

$\Rightarrow$  globaler Fehler bis zum Ende der Simulation ist  $\mathcal{O}(\Delta_t)$

$\Rightarrow$  Eulerverfahren ist ein Verfahren erster Ordnung

Euler-Cromer ist auch ein Verfahren erster Ordnung

### 3.1.4 Mittelpunkt-Algorithmus

$$x_{n+1} = x_n + \frac{v_{n+1} + v_n}{2} \Delta_t$$

$$(i) \Rightarrow x_{n+1} = x_n + v_n \Delta_t + \frac{1}{2} a_n \Delta_t^2 + \mathcal{O}(\Delta_t^3)$$

$\Rightarrow$  Zweite Ordnung bezüglich des Ortes

erste Ordnung bezüglich der Geschwindigkeit

### 3.1.5 Halbschritt-Algorithmus

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} + a_n \Delta_t$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \Delta_t$$

#### Nachteile

Nicht selbststartend ( $v_{-\frac{1}{2}}$  existiert nicht)

$\Rightarrow$  erster Schritt muss z.B. über Euler-Algorithmus berechnet werden

$$v_{\frac{1}{2}} = v_0 + a_0 \frac{\Delta_t}{2}$$

### 3.1.6 Euler-Richardson-Algorithmus

Idee: Kombination von Vollschritt und Halbschritt, so dass alle  $\mathcal{O}(\Delta_t^2)$ -Terme verschwinden

Buch: Anhang 3a

$$a_n = \frac{F(x_n, v_n, t_n)}{m}$$

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_n + a_n \frac{\Delta_t}{2}$$

$$x_{n+\frac{1}{2}} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \frac{\Delta_t}{2}$$

$$a_{n+\frac{1}{2}} = \frac{F(x_{n+\frac{1}{2}}, v_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})}{m}$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \Delta_t + \mathcal{O}(\Delta_t^3)$$

$$v_{n+1} = v_n + a_{n+\frac{1}{2}} \Delta_t + \mathcal{O}(\Delta_t^3)$$

gesamtes Verfahren hat globalen Fehler zweiter Ordnung

$\Rightarrow$  Algorithmus zweiter Ordnung

Diese Vorgehensweise der Kombination verschiedener Verfahren zur Auslöschung ungewollter Terme ist angeblich typisch.

Hier haben wir die Vollschrte sowie die Halbschrte berechnet, so dass wir die Differenz zwischen  $n$  und  $n + \frac{1}{2}$  nutzen können, um die Schrittweite zu steuern.

Somit können wir in diesem Verfahren eine adaptive Schrittweitenkontrolle einführen und somit Konvergenz und Rechenzeit verbessern.

Auf den ersten Blick machen wir doppelt so viele Berechnungen, jedoch geht hier der Halbschritt nicht in die Konvergenz ein, was der eigentliche Vorteil des Verfahrens ist.

Somit gewinnen wir sehr viel für die gewünschte Genauigkeit.

### 3.1.7 Verlet-Algorithmus (Leap-Frog)

Idee: Umgekehrte Taylorentwicklung

$$x_{n-1} = x_n - v_n \Delta_t + \frac{1}{2} a_n \Delta_t^2 + \mathcal{O}(\Delta_t^3) \text{ (iii)}$$

(iii) entspricht also (ii) rückwärts. Wir addieren beide:

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a_n \Delta_t^2 + \mathcal{O}(\Delta_t^4)$$

Wir verlieren die Terme dritter Ordnung und behalten Terme vierter Ordnung.

Wir können auch beide subtrahieren:

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2\Delta_t} + \mathcal{O}(\Delta_t^3)$$

Somit erhalten wir ein Verfahren, das dritter Ordnung im Ort und zweiter Ordnung in der Geschwindigkeit ist, welches ebenfalls nicht selbststartend ist.

### 3.1.8 Velocity-Verlet-Algorithmus

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta_t + \frac{1}{2} a_n \Delta_t^2$$

$$v_{n+1} = v_n + (a_{n+1} + a_n)/2 * \Delta_t$$

Es tauchen nur ganzzahlige  $n$  auf, so dass der Algorithmus selbststartend ist. Untersuchungen zeigen, dass die Energieerhaltung aus numerischen Gründen besser funktioniert.

### 3.1.9 Runge-Kutta-Algorithmus

(hier nicht im Detail erklärt)

RK N-ter Ordnung mit beinahe beliebigen ganzzahligen  $n$  RK ist ein verallgemeinerter Euler-Richardson-Algorithmus

Hier kombiniert man  $N$  Schritte beliebiger Länge per Addition und Subtraktion der entsprechenden Gleichungen mit beliebigem Gewicht. Gewichte in der Kombination, dass Terme mit  $\mathcal{O}(\Delta_t^i)$  verschwinden.

Euler-Richardson ist somit RK 2. Ordnung.

Standard: RK 4. Ordnung (siehe Buch)

Besonders: Der Halbschritt taucht doppelt auf, jedoch mit unterschiedlicher Gewichtung (*überraschend*)

Nicht selbstverständlich: **Fehlerkontrolle** Man rechnet mit Zeitschrittweite  $t$  und mit halber Zeitschrittweite und vergleicht beide miteinander. In RK erhöht man oftmals die Ordnung und vergleicht Ergebnisse unterschiedlicher Ordnung (auch in OSP: RK45 in numerics-Package)

*RK45* Fehlerkontrolle per Vergleich der Ergebnisse 4. und 5. Ordnung

### 3.1.10 Adaptive Algorithmen

*ODEMultiStepSolver* (ODE: Ordinary Differential Equation)

Dynamische Zeitschrittweite

Zielzeitschritt muss entsprechend überprüft werden, ist hier zum Glück schon implementiert.

### 3.1.11 Richardson-Extrapolation

Taylorentwicklung in beide Zeitrichtungen auch in der Geschwindigkeit. Kombination zu Verfahren vierter Ordnung, mit dem man höhere Ordnungen rekursiv berechnen kann.

### 3.1.12 Prädiktor-Korrektor-Verfahren

Idee: Eine erste Lösung wird vorausberechnet für  $x_{n+1}$ , überprüft und ggf. korrigiert. Heutzutage der anspruchsvollste Standard-Algorithmus bei Simulationspaketen.

einfachste Darstellung eines PK-Verfahrens:

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + v_n \Delta_t$$

$$\tilde{a}_{n+1} = \frac{F(\tilde{x}_{n+1})}{m}$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{a_n + \tilde{a}_{n+1}}{2\Delta_t}$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{v_{n+1} + v_n}{2\Delta_t}$$

NEUBERECHNUNG:  $\tilde{a}_{n+1}, v_{n+1}$  und  $x_{n+1}$ , bis wir zufrieden sind

Erst danach:  $\tilde{x}_{n+2}$  usw.

Vorteil:

Zusätzliche Konvergenz, so dass das Programm die Zahl der Iterationsschritte an die notwendige Genauigkeit anpasst.

Oftmals wird dieses Verfahren bei anspruchsvollen Simulationen genutzt, ansonsten RK4 oder RK45

## 3.2 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

verallgemeinerte Koordinaten  $q_i$ ,

verallgemeinerte Impulse  $p_i$

Hamilton-Funktion

$$H(q_i, p_i) = E_{kin} + E_{pot}$$

$$(\quad = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \frac{k}{2} (q_i - q_j)^2)$$

$$\dot{p}_i = \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

Phasenraum: Darstellung in  $q_i, p_i$

→ immer von Dimension  $2n$  bei  $n$  Freiheitsgraden

Im Phasenraum bleibt das Volumen, das durch die Anfangsbedingungen beschrieben wurde, erhalten.

Damit ergibt sich ein guter Test für die Stabilität des Systemes.

Symplektische Algorithmen:

Summe der Flächen der Projektion dieses Volumens auf die Ebenen  $(p_i, q_i)$  bleibt erhalten.

Somit sind symplektische Algorithmen einfachere Methoden als die tatsächliche Berechnung des Volumens.

zum Beispiel:

$$p_i^{k+1} = p_i^k + a_k F_i^k \delta$$

$$q_i^{k+1} = q_i^k + b_k p_i^{k+1} \delta$$

$$F_i^k = \frac{\partial E_{pot}(q_i^k)}{\partial q_i^k}$$

$$\Delta_t = M \delta$$

$$k = 0 \dots M - 1$$

$\delta$  - Zeitschritt für Zwischenrechnungen

Beispiele für symplektische Algorithmen:

Euler-Cromer

$$M = 1$$

$$a_0 = b_0 = 1$$

Verlet-Algorithmus

$$M = 2$$

### 3.3 ORTS- UND GESCHWINDIGKEITSABHÄNGIGE KRÄFTE

$$a_0 = a_1 = 1$$

$$b_0 = 2$$

$$b_1 = 0$$

Symplektische Algorithmen sind somit stabiler, da die gesamte Hamiltonfunktion simuliert wird. Für gerade M ist eine Zeitumkehrinvarianz gegeben.

## 3.3 Orts- und geschwindigkeitsabhängige Kräfte

### 3.3.1 Teilchen im Schwerkraftfeld

$$F(y) = \frac{mMG}{(R+y)^2}$$

G - Gravitationskonstante

M - Erdmasse

R - Erdradius

y - Abstand von NN

m - Körpermasse

Eine analytische Behandlung ist schwieriger, so dass sich numerische Methoden anbieten.

Interessante Fragestellungen:

- Ermitteln sie mit numerischen Methoden relevante Abweichungen zwischen  $F = \text{const}$  und  $F(y)$

### 3.3.2 Reibung und Luftwiderstand

$$F = -mg$$

Annahme:

$$F_{d1} = c_1 v$$

$$F_{d2} = c_2 v^2$$

c - Koeffizienten; abhängig von umgebendem Medium und Form des Objektes  
interessante Größe:

Terminalgeschwindigkeit (Grenzgeschwindigkeit)

$$v_{1max} = \frac{mg}{c_2}$$

$$v_{2max} = \sqrt{\frac{mg}{c_2}}$$

Beschleunigung

$$\frac{F_1}{m} = -g\left(1 - \frac{v}{v_{1max}}\right)$$

$$\frac{F_2}{m} = -g\left(1 - \frac{v^2}{v_{2max}^2}\right)$$

Beispiel: Kiesel 1 cm, 10 g

$$c_2 \approx 0.01 \text{ kg/m} \Rightarrow v_{2max} \approx 30 \text{ m/s}$$

Kleiner Trick bei Berechnung:

Vorsicht bei der Richtung der Kraft. Dafür ist  $F_g \sim -v * |v|$

### 3.3.3 2D-Bewegung mit Reibung

*Grafik ballistische Kurve*

$$ma_x = -F_d \cos(\Theta)$$

$$ma_y = -mg - F_d \sin(\Theta)$$

$$F_d = c_2 v^2$$

$$ma_x = -c_2 v v_x$$

$$ma_y = -mg - c_2 v v_y$$

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2$$

$\Rightarrow$  Beide DGL sind über das V gekoppelt  $\Rightarrow$  kompliziert und aufwendig

$$v_x =$$

$$v_y =$$

z.B. Stahlkugel 7kg  $\approx 0.01 \text{ m}^2$  Querschnitt  $\rightarrow c_2 \approx 0.1$  Aufgabenstellung:  $c_2 = 0.7$ , da sich deutlichere Änderungen ergeben

### 3.3.4 ODE-Interface

Im Programmpaket:

state array  $s[]$ , bestehend aus den Koordinaten und der Zeit ([y,v,t])

rate array  $r[]$   $r_i(s_0, \dots, s_{n-1}, t) = ds_i/dt$

z.B. freier Fall 1D

$$r_0 = s_1$$

$$r_1 = -g$$

$$r_2 = q$$



## 3.4 Zerfallsprozesse

$$\dot{N} = -\lambda N$$

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

Halbwertszeit:

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{\log 2}{\lambda}$$

Zerfall von einem e-tel der Kerne in  $\tau$ :

$$\tau = 1/\lambda$$

Beispiele:

- Radioaktivität
- Myonzerfall
- Bakterienwachstum
- Aufladen eines Kondensators
- Abkühlen einer Kaffeetasse

Verschiedene Größenordnungen bei Zerfallsprozessen

→ Zerfallskaskaden

Beispiel: Zerfall von Mn28:

Mn28 → Al28 → Si28

Mn → Al: 21 h

Al → Si: 2.3 min

⇒ Aluminium ist vollkommen uninteressant, da es beinahe unmittelbar zerfällt (verglichen mit den anderen Zeitskalen). Somit ist Al in der Simulation vernachlässigbar.

Ebenso sind große Halbwertszeiten (Jahre und Jahrhunderte) vernachlässigbar.

Abkühlen:

$$\dot{T} = -r(T - T_s)$$

$T_s$  - Umgebungstemperatur

## 3.5 Rotierender Ball

### 3.5.1 Magnus-Effekt

Idee: Die Oberflächengeschwindigkeit eines rotierenden Balles ist unterschiedlich. Somit ist die Geschwindigkeit der Luft an der Oberfläche des rotierenden Balles unterschiedlich

genug, um eine Bahnabweichung in Richtung\* der schnelleren Relativbewegung zu verursachen.

(eigentlich normal dazu)

$$F_d \sim v^2$$

$$F_M \sim v\delta v \sim vr\omega$$

$F_M$  - Magnuskraft

$$\frac{\vec{F}_M}{m} = C_M(\vec{\omega} \times \vec{v})$$

topspin: Bei einer Rechtsbewegung und einer Rotation des Balles im Uhrzeigersinn zeigt die resultierende Kraft nach UNTEN.

*Schematische Zeichnung eines sich drehenden, bewegten Balles*

$$\frac{\vec{F}}{m} = \vec{g} - C_d \vec{v}|\vec{v}| + C_M(\vec{\omega} \times \vec{v})$$

$$a_x = -C_d v v_x + C_M(\omega_y v_z - \omega_z v_y)$$

$$a_y = -C_d v v_y + C_M(\omega_z v_x - \omega_x v_z)$$

$$a_z = -C_d v v_z + C_M(\omega_x v_y - \omega_y v_x) - g$$

⇒Die Kopplung der Gleichungssysteme ist hier über den  $C_M$ -Term ersichtlicher als im C2-Reibungsfall.

### 3.6 Bewegung im Elektromagnetischen Feld

$$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$$

$E=0$ ,  $B=\text{const}$  ⇒ Spirale (einfache Variante, oft analytisch lösbar)

$$\omega_c = qB/m$$

Zyklotronfrequenz

Dipolfeld

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 m}{4\pi r^3} (3(\hat{p} \cdot \hat{r})\hat{r} - \hat{p})$$

$\hat{\cdot}$  → Einheitsvektor (nur Richtung relevant)

Teilchenbewegung im Dipolfeld ist ähnlich einer Spirale, jedoch ist sie analytisch nicht berechenbar. Das ist durch die Abhängigkeit der Kraft von  $\vec{r}$  bedingt.

Beispiel: siehe Buch (van-Allan-Gürtel, Magnetfeld der Erde in der oberen Atmosphäre, welches geladene Teilchen auf eine Bewegung zwingt, die sich zwischen Nord- und Südpol befindet und in einer engen Spirale verläuft.

Magnetfeld am Äquator:  $3.5 \cdot 10^{-5}$  T (oder so)

### 3.7 Bewegung eines Regentropfens

Radius  $R$ , Luftreibung

Stokes  $F_d = 6\pi\eta Rv$

$\eta$  - Viskosität der Luft

Grenzgeschwindigkeit bei  $R \approx 0.01mm$

$$v_{1max} \approx 1cm/s = 36m/h$$

$$m \sim R^3, F_d \sim R \Rightarrow v_{1max} \sim R^2$$

funktioniert bis  $R \approx 0.1mm$

$$\Rightarrow v_{1max} \approx 1m/s = 3.6km/h$$

$R \approx 1mm \Rightarrow$  turbulente Strömung (zwischen 0.1 und 3 mm)

$$F = C_d \pi R^2 \frac{1}{2} \rho v^2$$

$$C_d \approx 0.5$$

$\pi R$  - Querschnitt

$\rho$  - Dichte der Luft

$\Rightarrow$

$$v_{2max} \approx 4.5m/s \approx 16km/h$$

$$v_{2max} \sim \sqrt{2R}$$

gilt bis  $r \approx 3mm \Rightarrow 28km/h$

$R \geq \approx 3mm \Rightarrow$  Verformung zum Pfannkuchen

$R$  wächst bis  $R \approx 5mm \Rightarrow v_{2max} \approx 29km/h$  bis ca. 5.5 mm

$R \approx 5.5mm \Rightarrow$  Aufspaltung auf mehrere Tropfen

Grenzbereiche sind mit Vorsicht zu genießen, da meist beide Formulierungen Einfluss haben.

## 4 Schwingungen

### 4.1 Feder rückstellende Kraft

$$F = -kx$$

$$\ddot{x} = -\omega_0^2 x$$

$\omega_0$  - Eigenfrequenz

$$\omega_0^2 = k/m$$

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \delta)$$

Vorteil der Sinus-freien Schreibweise: Amplitude  $A$  und Phase  $\delta$  sind direkt ersichtlich.

#### 4.1.1 Harmonischer Oszillator

Periode

$$T = \frac{2\pi}{\omega_0} = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{k}{m}}}$$

$\Rightarrow$  Periode ist unabhängig von Amplitude und Phase

Energieerhaltung:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kA^2$$

### 4.2 Pendel

$\theta, mg, L$  (Länge)

$$v = L\dot{\theta}$$

$$a = L\ddot{\theta} = -g \sin(\theta) \sim -g\theta$$

$\rightarrow$  harmonische DGL (nur Annäherung, ohne Sinus-term!)

$$E = \frac{1}{2}mL^2(\dot{\theta})^2 + \frac{1}{2}mgL(1 - \cos(\theta))$$

### 4.2.1 Konservative Systeme

$$E_{tot} = E_{kin} + E_{pot} = const$$

Konsequenzen im Phasenraum:

- Bahnen schneiden sich nicht (gilt für alle deterministischen Systeme)  
 $\Rightarrow$  Ensemblesimulationen sind möglich, da Bahnen unabhängig sind
- *Vierecke* im Phasenraum ändern zwar ihre Form, jedoch ist die Fläche konstant

## 4.3 gedämpfter harmonischer Oszillator

$$F_d = -\gamma v \quad \gamma - \text{Reibungskoeffizient}$$

$\Rightarrow$  dissipatives System: Energieerhaltung gilt, jedoch wird Teil der Reibung in Wärme umgesetzt.

Periode in Abhängigkeit von  $\gamma$

Relaxationszeit  $\tau$ : Abnahme der Amplitude auf  $\frac{1}{e} \approx 0.37$

kritische Dämpfung: Keine Schwingung, nur monotoner Abfall  $\gamma_c$  - kleinstes Gamma, bei dem nichts mehr schwingt.

überkritischer/überdämpfter Fall: Monotoner Abfall der Auslenkung (Kriechfall)

Phasenraum:  $(x_0, p_0)$  Anfangsbedingung  $\rightarrow (0, 0)$  in jedem Fall

$\Rightarrow$  Attraktor: Jede Bahn wird von  $(0, 0)$  angezogen. Die Bahnen bilden dabei Spiralen.

$$F_d = -\gamma \dot{\theta} \quad \text{für Pendel am Faden}$$

Wirklich interessant wird es, wenn wir eine äußere Kraft hinzufügen. Lustig werden periodische Anregungen:

## 4.4 äußere Kräfte

Gesucht: Antwort (response) des Systemes auf den Einfluss einer periodischen äußeren Kraft

### 4.4.1 $F(t) = mA_0 \cos(\omega t)$

Ergebnis: Periodische Schwingung, allerdings unterscheiden wir zwischen dem transienten Verhalten und dem Steady State.

#### transientes Verhalten

- Übergangsfall, Einschwingvorgang, Relaxation
- abhängig von Anfangsbedingungen

### steady state

- dynamisches Gleichgewicht
- dominiert von  $\omega$  für  $t \gg 0$   
 $x(t) = A(\omega) \cos(\omega t + \delta)$   
 $\delta$  - Phasendifferenz zur äußeren Kraft

### Eigenschaften des Systemes

- Maximale Amplitude bei  $\omega_{max} \sim \omega_0$
- Lineare Antwort (linear response) (liegt an linearer Bewegungsgleichung)
- $A(\omega = 0) < A(\omega)$  für kleine  $\omega$
- $A(\omega) \rightarrow 0$  für  $\omega \gg \omega_0$   
 (Keine ausreichend schnelle Systemantwort möglich, so dass sich der Einfluss ausmittelt)

#### 4.4.2 Kraftstoß (oftmals periodisch)

Dauer  $\Delta_t$

Periode  $T = \frac{2\pi}{\omega}$

Halbwelle ebenso denkbar:

$$F(t) = mA_0 \cos(\omega t) \Theta(\cos(\omega t))$$

$\Theta()$  - Heavyside-Funktion

Beispiel:

$$\frac{F(t)}{m} = \frac{1}{\pi} + \frac{1}{2} \cos(t) + \frac{2}{3\pi} \cos(2t) - \frac{2}{15} \cos(4t)$$

Superpositionsprinzip: Auf lineare Differentialgleichungen anwendbar im Steady State.  
 (herumspielen mit Pendelapplet von Robert Doerner)

## 4.5 Elektrische Schwingkreise

### 4.5.1 Kirchhoff'sche Gesetze

Widerstand beeinflusst Spannung:  $V_R = IR$

Kondensator  $V_C = Q/C$

Spule  $V_L = L\dot{I}$

Strom  $I = \dot{Q}$

(Einheiten in Volt, Ampere, Ohm, Farad und Henry)

Stromquelle (Source)  $V_S$   
 = Potential  
 = Energie für die Ladung, die sich durch den Stromkreis bewegt

$$V_S = V_R + V_C + V_L$$

$$V_S(t) = L\ddot{Q} + R\dot{Q} + Q/C$$

Terme: Kraft Beschl. Reibung rücktreibende Kraft

### 4.5.2 Korrespondenz

Q - x  
 I - v  
 V - F  
 L - m  
 C -  $\frac{1}{k}$   
 R -  $\gamma$

⇒ Entspricht numerisch einem harmonischen Oszillator  
 Grafische Darstellung eines Schwingkreises per Schaltplan  
 Beispiel:

$$V_S(t) = V_0 \cos(\omega t)$$

Gleiche Beobachtungen wie bei mech. Pendel: Einschwingvorgang und Steady State

Stichwort Hoch-/Tiefpassfilter  
 RCApp

Cutofffrequenz: Amplitude der Spannung am Ausgang ist auf  $1/\sqrt{2}$  der Spannung am Eingang gefallen  
 Phasenverschiebung zwischen Eingang und Ausgang  
 LCR-Kreis  
 Antwort (Response): Strom (nicht Ladung)

$$I_{max}(\omega) - \text{Resonanz}$$

Resonanzfrequenz:  $\omega$  bei  $I_{max}$   
 Schärfe der Resonanz: Q-Faktor (Qualitätsfaktor, NICHT Ladungsfaktor!)

$$Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega}$$

$\Delta\omega$ : I auf  $\frac{1}{\sqrt{2}} I_{max}$  abgefallen

Impedanz:

$$Z = \frac{U_{max}}{I_{max}}$$

$$Z^2(\omega) = R^2 + (\omega L - \frac{1}{\omega C})^2$$

⇒ Bei Resonanz ist Impedanz minimal

In Prüfung nicht auswendig, allerdings wichtig, dass Schwingkreise wie mech. Schwingungen behandelbar sind (Resonanz und so) und dass eine Korrespondenz existiert. Allein von der Anschauung müsste man das meiste schon verstehen.

## 4.6 Chemische Oszillationen

Beispiel: Chemische Reaktion  $A + 2 B \rightarrow 3 B + C$  mit A, B, C als Konzentrationen von 3 Molekülen.

Ratengleichungen (Rate Equations)

$$\dot{A} = -kAB^2$$

Vorgehensweise:

- proportional zu A
- doppelt proportional zu B (wegen Vorfaktor)
- negatives Vorzeichen
- k als genereller Vorfaktor

$$\dot{B} = +kAB^2$$

Beispiel:

$A \rightarrow x$

$B + x \rightarrow y + D$

$2x + y \rightarrow 3x$

$x \rightarrow C$

## 4.7 Nerven einer Krabbe

1952 von Hodgkin & Huxley modelliert

Potential einer Nervenmembran als Kondensator beschrieben

Strom  $I = \dot{Q}$  modelliert (Kalium-Natrium-System)

Äußere treibende Kraft: Stimulanz von außen

Formeln siehe Buchkapitel 4.8

Aus konstantem Strom werden Nervenimpulse, deren Frequenz von der Amplitude des Stromes abhängen. Es gibt eine Totzeit, in der kein zweiter Impuls abgefeuert werden kann.



## 5 Mehrkörperprobleme

### 5.1 Planetenbewegungen

Tycho Brahe hat vor einigen Jahrhunderten Daten gesammelt, die Kepler zu drei Gesetzen zusammen gefasst hat. (Aus einer gigantischen Tabelle! Per Hand!)

1. Planeten bewegen sich auf Ellipsenbahnen mit Sonne in einem Brennpunkt
2. Planetenbewegung: Fläche, die in gleicher Zeit überstrichen wird, ist konstant (Flächensatz)
3.  $\frac{T^2}{a^3} = \text{const.}$   
T - Umlaufzeit  
a - große Halbachse

### 5.2 Bewegungsgleichungen

Zweikörperproblem mit  $M \gg m$  (auch als Einkörperproblem mit  $\mu$  darstellbar)

Newton:

$$\vec{F} = -\frac{GMm}{r^3}\vec{r}$$

$$G = 6.67 \times 10^{-11} \frac{m^3}{kg \ s^2}$$

Es kommt wirklich nur auf die Schwerpunkte der Körper an, wobei die Ausdehnung der Körper egal ist (im idealen Fall der homogenen Masseverteilung innerhalb beliebiger konzentrischer Kugelschalen innerhalb der Körper).

Newton hat 20 Jahre mit der Veröffentlichung gewartet, bis er diesen Sachverhalt bewiesen hat.

$\vec{F}_G$ : Zentralkraft

$\Rightarrow$  Bewegung in einer Ebene

$\Rightarrow$  Drehimpulserhaltung  $L = \text{const}$  gilt

$\vec{L}$  zeigt senkrecht zur Ebene

$\Rightarrow$  Vektoreigenschaften von L sind egal

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{GMm}{r}$$

$E < 0$ : gebundener Zustand

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{GMm}{r^3}\vec{r}$$

$\Rightarrow$

$$\ddot{x} = -\frac{GM}{r^3}x$$

$$\ddot{y} = -\frac{GM}{r^3}y$$

$$r^2 = x^2 + y^2$$

### 5.3 Kreisbahnen

$b = a = r$ ;

$$a = v^2/r = \frac{GM}{r^2}$$

$$v = \sqrt{\frac{GM}{r}}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$T^2 = \frac{4\pi^2}{GM}r^3$$

drittes Keplersches Gesetz

### 5.4 Astronomische Einheiten

Vermeidung numerischer Ungenauigkeiten

Längeneinheit  $AU = a_{Erde} = 1.496 \times 10^{11}m$

Zeit  $1 \text{ y} \Rightarrow T_{Erde} = 1$

$$\Rightarrow GM = 4\pi^2 \left( \frac{AU^3}{y^2} \right)$$

### 5.5 Kepler's 3. Gesetz

$$T^2 = Ca^3$$

#### 5.5.1 Linearer Fit

$$2 \ln T = 3 \ln a + \ln C$$

$\Rightarrow$ Lineare Gleichung YAY

## 5.6 Simulation der Erdbahn

PlanetApp

PlanetKeplerApp

Kraftstöße verändern  $v$ , nicht  $r$

## 5.7 $v$ -Darstellung

Diagramm:  $v_y(v_x)$  ergibt Kreis mit  $\vec{w}$  als Zentrum und  $\vec{u}$  als Radialvektor.

$$u = \frac{GMm}{L(m)}$$

$\Rightarrow u$  ist unabhängig von  $m$ !

$$\vec{r} \perp \vec{u}$$

(in Ebene, nicht nur im Phasendiagramm)

## 5.8 Dreikörperproblem

Kleine Wechselwirkung zwischen zwei Planeten wird berücksichtigt. Kraft setzt sich aus Zentralkraft und interplanetarer Gravitationskraft zusammen. Eigentlich muss man hier schon in 3 Dimensionen rechnen. Beispiel in 2D: Sonne und 2 Planeten.  $m_1, m_2 \ll M$

$$\ddot{\vec{r}}_1 = -\frac{GM}{r_1^3} \vec{r}_1 + \frac{Gm_2}{r_{21}^3} \vec{r}_{21}$$

$$\vec{r}_{21} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$$

$$\ddot{\vec{r}}_2 \text{ äquivalent}$$

Planet2App

### 5.8.1 andere Kräfte

$$F = \frac{Cm}{r^{2+\delta}} \ll 1$$

zB allgemeine Relativitätstheorie

$$\ddot{\vec{r}} = -\frac{GM\vec{r}}{r^3} \left( 1 + \alpha \left( \frac{GM}{c^2} \right) \frac{1}{r^2} \right)$$

### 5.8.2 analytische Lösungen des 3-Körper-Problems

3 Körper mit gleicher Masse in 2D

- Euler 1765: 3 Massen auf 1 Linie  
Rotation um mittlere Masse
- Lagrange 1772: 3 Massen auf Ecken eines gleichseitigen Dreiecks
- Moore 1993: numerisch
- 2000: Beweis von Chenciner & Montgomery

→ThreeBodyConditionsApp

Resonanzen in Asteroidengürtel Sonne, Jupiter, Asteroidengürtel →Planet2App Abstände des Asteroiden von Sonne: Kirkwood-Lücken Resonanzen, wenn  $T_{Ast.}$  einfacher Bruch von  $T_{Jup.}$  ( $1/3, 3/7, \dots$ )

Idee: Histogramm erstellen und stabile Bahnen aus beliebigen Startbedingungen ermitteln

### 5.8.3 Beschreibung des Heliumatoms auf klassische Weise

Behandlung entsprechend des Gravitationsprozesses, jedoch mit Abstoßungskraft anstatt Anziehung (an einigen Stellen).

Problem: instabile Numerik in Kernnähe

$$Q_{Kern} = 2$$

$$q_{el} = -1$$

Bild von berechneter Elektronenbahn: Ein Elektron in Kernnähe und ein anderes in gewissem Kernabstand, jedoch weder kreisförmig noch elliptisch, sondern beinahe chaotisch.

## 5.9 Zwei-Körper-Streuung

Nutzen für Materialwissenschaftler

Idee: Von links trifft ein Teilchenstrahl auf ein Objekt. Wir betrachten einen Ring des Teilchenstromes mit Abstand  $b$  vom Zentrum. Umfang:  $2\pi b$ . Infinitesimale Fläche des Ringes:  $2\pi b db$ . Streuer (Betrachtung: ein schweres Teilchen) liegt rechts auf Achse. Es wird als unbeweglich angenommen (schwer). Durch eine Wechselwirkung (iA abstoßend) wird der Teilchenstrom nach außen abgelenkt. Diese Ablenkung wird durch einen Winkel  $\theta$  beschrieben. In einem bestimmten Abstand betrachten wir den Teilchenstrom erneut. Als Fläche ergibt sich:  $A = \alpha 2\pi \sin(\theta) |d\theta|$  mit  $\alpha$  als Abstand vom schweren Teilchen.

Vorher:  $\vec{v}$ , nachher:  $\vec{v}'$

Annahme: Elastische Streuung (Impulserhaltung)  $\Rightarrow |\vec{v}| = |\vec{v}'|$  Interessieren uns für Streuwinkel  $\theta$  bzw. differentiellen Streuquerschnitt:

### 5.9.1 differentieller Streuquerschnitt

$$dN/N = n\sigma(\theta)d\Omega$$

N - Teilchenzahl im Strahl dN - Zahl der Teilchen, die in Raumwinkel dΩ gestreut werden

$$d\Omega = \sin(\theta) |d\theta| d\phi$$

n - Dichte der Streuer (Anzahl pro Fläche/Querschnitt) σ - Anteil der in den Raumwinkel dΩ gestreuten Teilchen θ - Streuwinkel

alternative Vorstellung:

$$\sigma(\theta) = d\sigma/d\Omega = \frac{bdbd\phi}{d\Omega}$$

b - Streuparameter Verhältnis Fläche zu Winkel bzw. infinitesimaler Querschnitt zu Winkel.

$$= \frac{bdb}{\sin(\theta) d\theta}$$

Ausnutzung der Symmetrie

### 5.9.2 Beispiel

1 Streuer:

$$n = \frac{1}{\pi R^2}$$

R - Radius des Streuers

Gesamtstreuquerschnitt (T für Total):

$$\sigma_T = \int \sigma(\theta) d\Omega$$

- ScatterApp
- ScatterAnalysis

Anmerkung: θ läuft von 0 bis π. Der Rest wird von Ω abgedeckt.

### 5.9.3 Anwendung

zB Wasserstoffatom als Streuer für Positronen

$$Kraft(kleinf) : f(r) = 1/r^2 - r/a^3$$

für  $r \ll a$  Terme: Abstoßung und eff. Ladung

$$f(r) = 0 \text{ für } r > a$$

$$f \sim F(\text{Vernachlässigung der Konstanten})$$

eff. Ladung: Homogen in Kugel mit Radius a verteilt. → innerhalb von a wirkt nur Teil der Ladung (*Ladung wird abgeschirmt*)

Cain präsentiert numerische Teilchenstreuungssimulation

### 5.9.4 Rutherfordstreuung

1911: Geiger & Marsden Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Goldfolie  
 Schlussfolgerung von Rutherford: Kern  $\ll$  Atom

### 5.9.5 abgeschirmtes Coulomb-Potential

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-r/a}$$

$$\vec{F}(r) = -\nabla V$$

Symmetrie:  $f = -dV/dr$

Verschiedene Bezeichnungen:

- Thomas-Fermi-Potential  
 zB Elektronen im Metall  
 a : Thomas-Fermi-Abschirmlänge
- Yukawa-Potential  
 zB für Wechselwirkung von Kernteilchen unter einander
- Debye-Potential  
 zB klassisches Plasma

van-der-Waals-Potential zwischen Molekülen:

$$\vec{f}(r) = 2/r^{13} - 1/r^7$$

Ableitung:  $1/r^{12} - 1/r^6$

## 6 Chaotische Bewegung

Erstes Gebiet, bei dem der Computer von Beginn empirisch eingesetzt wurde. Chaos (griech): Das Große Gähnen (Leere)

### 6.1 Logistische Abbildung

Beispiel: Populationsdynamik (diskrete Zeitschritte  $\rightarrow$  diskrete Gleichung)

$$P_{n+1} = aP_n - bP_n^2$$

Mögliche Einflüsse für zweiten Term

- Überbevölkerung
- Krankheiten
- Ressourcenknappheit

$$r = \frac{a}{4}$$

$$r \in [0, 1]$$

$$x_n = \frac{b}{a}P_n$$

$$x_n \in (0, 1]$$

$$x_{n+1}(x_n) = f(x_n) = 4rx_n(1 - x_n)$$

grafische Iteration mit Darstellung der Konvergenz im Schnittpunkt zwischen  $x$  und  $f(x)$

$\rightarrow$  IterateMapApp (Populationsentwicklung und so)

Trajektorien betrachtet

$r < \frac{1}{4}$  : stabiler Fixpunkt:  $x^* = 0$

$r < \frac{3}{4}$  : instabiler Fixpunkt:  $x^* = 0$

stabiler Fixpunkt:  $x^* = 1 - \frac{1}{4r}$

$$x^* = f(x^*)$$

$$\Rightarrow x^* = 1 - \frac{1}{4r}$$

$$f'(0) = \left. \frac{df}{dx} \right|_0 = 4r$$

$$f'(1 - 1/(4r)) = 2 - 4r$$

$$f(x) = 4rx(1 - x)$$

$$f'(x) = 4r - 8rx$$

Stabilitätsaussagen:

$$x_n = x^* + \epsilon_n \text{ für } |\epsilon| \ll 1$$

Taylor-Entwicklung:

$$x_{n+1} \approx f(x^*) + \epsilon_n f'(x^*)$$

$$x^* + \epsilon_{n+1} = x^* + \epsilon_n f'(x^*)$$

$$\epsilon_{n+1}/\epsilon_n = f'(x^*)$$

Links steht die Abweichung vom Fixpunkt.

Wenn  $f'(x^*) < 1$ : Abweichung wird immer geringer  $\Rightarrow$  stabiler FP

$f'(x^*) = 1$ : marginal stabil

$f'(x^*) > 1$ : instabil

$f'(x^*) = 0$ : superstabil

(nur in erster Ordnung der Taylorentwicklung)

zB  $r = \frac{1}{2}, x^* = \frac{1}{2}$

$f'(x^*) \Leftrightarrow$ : BETRAG!

$r = 3/4$ : Bifurkation (*Zweigabelung*): Aufteilung in zwei Stränge

$$r < \frac{1 + \sqrt{6}}{4} : \text{ZweiFixpunkte}$$

Oszillationen zwischen FP mit Periode 2

*Stabiler Attraktor*  $\rightarrow$  nur noch in dichter Nachbarschaft der beiden Trajektorien

entspricht 2 FP von  $f^{(2)}(x) = f(f(x))$  (Periode 2)

hier: präziser Ausdruck *Fixpunkt*, sonst *nur* Oszillation

$r = 0.862372$ : Periodenverdopplung

$r < 0.886023$ : Periode 4

FP von  $f^{(4)}$

Bifurkationen für  $r = b_k$

$b_1 = 0.75$

$b_2 = 0.862..$

$0.886..$

$0.891102..$

$0.892190..$

$b_\infty = 0.8924864..$

Danach: Chaos (keine Fixpunkte mehr auffindbar)

$\Rightarrow$  BifurcateApp



vom Chaos zur Ordnung:

$r < 0.9126$ .. zwei Bänder in  $f^{(2)}$  1 Band

$r < 0.899$ .. 4 Bänder in  $f^{(4)}$  1 Band

$$f^{(3)}(x^*) = x^* \text{ für } r \geq \frac{1+\sqrt{8}}{4} = 0.957107 \text{ } r < 0.960375$$

nachfolgende Bereiche mit kleiner Periode sind bedeutend kleiner

$f^{(3)}$  ist Polynom 8. Ordnung

8 FP, davon 3 stabile FP

durch 3 stabile FP wird Bereich des Chaos' verlassen

Danach Bifurkationen mit 6, 12, 24 usw. Perioden bis zum Chaos.

Wenn wir knapp unter kritischem  $r$  sind (zB 0.9571):

Trajektorie, die sich durch sogenannte Intermittenz auszeichnet:

nahezu periodisches Verhalten (Vermutung der Periode 3 ist richtig) wechselt sich ab mit chaotischem Verhalten.

⇒GraphicalSolutionsApp

Fixpunkte betrachtbar. Einfach mal ansehen

### 6.1.1 Analyse eines chaotischen Verhaltens

Kriterium: Hohe Empfindlichkeit hinsichtlich der Anfangsbedingungen.

→Test hinsichtlich des  $x_0$  Beispiel: Differenz zweier Trajektorien

Quantitative Analyse: Lyapunov-Exponent (→wiki)

## 6.2 Universelle Eigenschaften

### 6.2.1 Feigenbaumkonstante

$$b_k \approx r_\infty - C\delta^{-k}$$

$\delta$  - Feigenbaumkonstante = 4.6692...

$$\delta = \lim_{k \rightarrow \infty} \delta_k$$

$$\delta_k = \frac{b_k - b_{k-1}}{b_{k+1} - b_k}$$

### 6.2.2 Symmetrie um $x = \frac{1}{2}$

$s_m = r$ , wenn ein Fixpunkt  $x^* \equiv \frac{1}{2}$

superstabile Trajektorien mit Periode  $2^{m-1}$

$$f^{(2^{m-1})}\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}$$

z.B.  $m=2$ :

$$f^{(2)} \Rightarrow 8r^2(1-r) - 1 = 0$$

$$s_2 = (1 + \sqrt{5})/4 (\text{interessanter Fixpunkt})$$

$$\text{und } s_2 = \frac{1}{2} (\text{uninteressanter Fixpunkt})$$

Weitere Werte für  $s_m$  für verschiedene  $m$  stehen im Buch.

Bestimmen wir das  $\delta_m$  wie  $\delta_k$  oben:

$$\delta_m = \frac{s_m - s_{m-1}}{s_{m+1} - s_m} \rightarrow \delta$$

$\delta_m$  ist konvergenter als  $\delta_k$ , da superstabile Trajektorien zu Grunde liegen.

### 6.2.3 Abstände der Fixpunkte von $\frac{1}{2}$

Abstände  $f(s_m) - \frac{1}{2}$ :  $d_k$  (komisch, dass nicht  $d_m$ )

$$d_k = x_k^* - \frac{1}{2}$$

Die  $d_k$  alternieren im Vorzeichen.

$$\alpha = \lim_{k \rightarrow \infty} -\frac{d_k}{d_{k+1}}$$

= 2.5029...

$\alpha$  ist eine weitere universelle Konstante

### 6.2.4 Abstände der Bifurkationspunkte

Ich denke mal *siehe Buch*

### 6.2.5 andere Abbildungen

z.B.

$$f = xe^{r(1-x)}$$

$$x_0 > 0$$

$r$  beliebig

Anwendung beispielsweise in der Ausbreitung von Krankheiten.

$$f = r \sin(\pi x)$$

$$r \in (0, 1]$$

$$x \in [0, 1]$$

Auch hier taucht auf:

- Bifurkationen
- $\alpha$
- $\delta$

wie bei logistischer Abbildung (deshalb *universell*)

”Der Weg ins Chaos is universell” mit den Bifurkationen. Universell für eine sehr große Klasse von Abbildungen, nämlich Abbildungen mit quadratischem Maximum:

$$f'(x_{max}) = 0 \quad f''(x_{max}) < 0$$

Analogie auch für nichtdiskrete Systeme:

Differentialgleichungen zeigen auch  $\alpha$  und  $\delta$  zB nichtlineare Stromkreise (RLC-Kreise): Ausgangsspannung zeigt Bifurkationen

Turbulenzen: Strömung von Wasser um Hindernisse  $\rightarrow$  Reynolds-Zahl  $v$  klein: laminar  
 $v$  größer: Wirbel  $v$  noch größer: Wirbel lösen sich ab  $v$  sehr groß: Turbulente Strömung, chaotisch  $\rightarrow \delta$  und  $\alpha$

chemische Reaktionen (chaotisches Verhalten nur bei bestimmten Parametern) auch hier Periodenverdopplung

## 6.3 Quantitative Beschreibung des Chaos

Untersuchen empfindliche Abhängigkeit von den Anfangswerten  $x_0$

$$|\Delta x_n| = |\Delta x_0| e^{\lambda n}$$

$\lambda$  - Lyapunov-Exponent für  $n \rightarrow \infty$

Ganz monoton klappt das Ganze nicht, da es manchmal Sprünge gibt (durch Beschränkung auf endliches Intervall)

Für viele verschiedene  $x_0$  muss gefittet und gemittelt werden.

Außerdem überspringt der rechte Term 1 und verlässt somit das Intervall.

besser:

$$\begin{aligned} \lambda &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \frac{|\Delta x_n|}{|\Delta x_0|} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln \left| \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} \right| \end{aligned}$$

Interpretation: Jedes  $x_i$  wird als neuer Startwert genommen und betrachtet, wie stark ein einzelner Schritt abweicht.

Infinitesimale Überlegung:

$$\Delta x \rightarrow dx$$

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln |f'(x_i)|$$

$$f'(x_i) = 4r(1 - 2x_i)$$

→ für beliebige Startwerte von  $x_i$  lässt sich der Lyapunov-Exponent bestimmen, jedoch sollte man das Einschwingverhalten vernachlässigen.

$\lambda = 0$ : Trajektorie divergiert algebraisch d.h. mit Potenz von  $n$  im Gegensatz zur exponentiellen Divergenz in der einfachen Gleichung oben. *Das System befindet sich am Rande des Chaos. Wir sind im Bereich des schwachen Chaos.*

Schreiber erzählt von der Abweichung vom Laplacedämon. Auch im Chaos kann man Vorhersagen treffen, jedoch sind die Vorhersagen durch minimale Abweichungen ungenau. Ebenso erzeugen kleinste Störungen große Abweichungen, wodurch Vorhersagen erschwert werden.

## 6.4 Kontrolle des Chaos

Idee: Für beliebige  $r$  (im chaotischen Bereich) gibt es ( $\infty$  viele) Trajektorien, die instabil sind. Suche eine  $x_0$ , so dass Trajektorie periodisch wird.

Suche gezielt nach Störung der chaotischen Trajektorie, so dass das System auf periodischer Trajektorie bleibt. Kontrolle über diese Störung.

*akademischer Algorithmus:*

- instabile periodische Trajektorie

$$f^{(p)}(x^*) = x^*$$

Trajektorie ist beispielsweise  $x(1), x(2), \dots, x(n), \dots, x(p)$   
periodisch, aber instabil

- tatsächliche chaotische Trajektorie verfolgen:  
 $x_0, \dots, x_n, \dots$
- warten, bis irgend ein  $x_n \approx x(i)$   
im chaotischen Bereich geschieht dies immer irgendwann
- *Kontrolle*: passen  $r$  so an, dass aktuelles  $x_{n+1}$  näher an Zielwert  $x(i+1)$  landet  
Somit wird das periodische Verhalten erzwungen.

Methode: Taylorentwicklung von  $f(x_n)$  und  $x(i)$  um  $r_0$

$$x_{n+1} - x(i+1) = \frac{\partial f}{\partial x}|_{x(i)} [x_n - x(i)] + \frac{\partial f}{\partial r}|_{r_0} \Delta r \stackrel{!}{=} 0$$

Anpassung:

$$r = r_0 + \Delta r$$

$$\Delta r = -r_0 \frac{1 - 2x(i)}{x(i)} \frac{x_n - x(i)}{1 - x(i)}$$

## 6.5 Nullstellen von $g(x) = f(x) - x$

### 6.5.1 Bisektion

$x_l, x_r$  so gewählt, dass  $g(x_l)g(x_r) < 0$   
bestimmen  $x_m = \frac{x_l + x_r}{2}$

$$g(x_l)g(x_m) < 0 : x_r = x_m$$

$$x_l = x_m \text{ sonst}$$

bei  $x_m = 0 : x_m$  ist Nullstelle

bisection method RecursiveFixPointApp FixedPointApp

Verfahren funktioniert immer, ist aber sehr langsam:

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n / 2$$

$\epsilon$  - initiale Intervallbreite  $x_r - x_l$

$$\log_2 \frac{x_r - x_l}{\epsilon}$$

Probleme:

- absolute Genauigkeit problematisch für  $x_0 \gg$
- relative Genauigkeit für  $x_0 \approx 0$

### 6.5.2 Tangentenverfahren von Newton / Newton-Raphson

Taylorentwicklung:

$$g(x) \approx g(x_1) + (x - x_1)g'(x_1)$$

$x_1$  - Anfangsvermutung

$$g(x) \stackrel{!}{=} 0$$

$$x = \dots \equiv x_2$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{g(x_n)}{g'(x_n)}$$

Iteration konvergiert schnell, wenn sie überhaupt konvergiert.

$$\epsilon_{n+1} = -\epsilon_n^2 \frac{f''(x)}{2f'(x)}$$

Kann schief gehen, wenn die Ableitung klein ist, da wir durch eine kleine Zahl dividieren.

grafische Veranschaulichung. Hatten wir auch unter anderem in chemischer Kinetik.

Lösung: Wird das Intervall nicht kleiner,

Herausforderung: Nullstellen der Funktion  $g(x) = 3/x^2 + 1/\pi^4 + \ln(\pi - x)^2 + 1$

### 6.5.3 Sekantenverfahren

$$x_1 = x_l$$

$$x_2 = x_r$$

$x_{m+1}$  aus linearer Interpolation zwischen  $x_m$  und  $x_{m-1}$

Wenn zweite Ableitung nicht zu böse, sollte das Vorzeichen wechseln.

$$|\epsilon_{m+1}| \approx \text{const} \times |\epsilon_m|^\tau$$

$\tau$  - goldener Schnitt (1.618...)

### 6.5.4 Regula falsa

Funktioniert wie Sekantenverfahren, nutzt gegebenenfalls jedoch nicht  $x_m$  und  $x_{m-1}$ , sondern  $x_{m+1}$  und  $x_{m-1}$ , entsprechend dem Vorzeichen.

Man wählt die Sekante also so, dass die Nullstelle im entsprechenden Bereich liegt

Somit verbessert sich das Konvergenzverhalten gegenüber des Sekantenverfahrens.

Leider ist die Regula falsa kein perfektes Verfahren. Gegenbeispiel: Funktion mit steilem Anstieg:  $g(x) = (x - 4)^* - 20$

### 6.5.5 Quadratische Interpolation

3 Punkte  $\rightarrow$  Parabel durch  $(x_i, g(x_i) = y_i)$

$$x_i = g^{-1}(y_i)$$

$x_i$  als quadratische Funktion von  $y_i$

$y = 0 \Rightarrow$  Nullstelle  $x_0$

### 6.5.6 mehrdimensionale Probleme

#### Newton-Raphson

$$\vec{g}(\vec{x}) = \vec{0}$$

Taylor

$$g_i(\vec{x}_{n+1}) = g_i(\vec{x}_n) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial g_i}{\partial x_j} (\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n)$$

$$= g_i + G_{ij} \xi_j \stackrel{!}{=} 0$$

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \vec{\xi}$$

$$= \vec{x}_n - \overset{\leftrightarrow}{G}^{-1} \vec{g}(\vec{x}_n)$$

also wie newton-raphson.

Ist etwas unhandlich, da die gesamte Matrix benötigt wird. In den Bibliotheken transparent implementiert.

## 6.6 Billiards

Beschreiben auf sehr einfache Weise chaotisches Verhalten  
Bild:

- Eine Billardkugel bewegt sich geradlinig
- $v = \text{const.}$
- Nur elastische Stöße am Rand.
- Rotation wird vernachlässigt
- Jeder Randstoß ist der nächste Schritt

einfache Systeme mit chaotischem Ausgang

- Stadion-Billard (Halbkreis-Rechteck-Halbkreis)
- Sinai-Billard (Quadrat nehmen und Kreis ausschneiden)

Begründung des chaotischen Verhaltens jeweils über Lyapunov-Exponenten

## 6.7 Mehrdimensionale Modelle

Henon-Abbildung:

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= y_n + 1 - ax_n^2 \\ y_{n+1} &= bx_n\end{aligned}$$

Attraktor

Einzugsgebiet (*basin*) des Attraktors ist die Menge der Anfangspunkte, von denen aus die Trajektorien nicht loskommen.

Beschreibung des Chaos:

- qualitativ: Selbstähnlichkeit
- quantitativ: Lyapunovexponenten

Lustige Modelle:

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= 1 - y_n + |x_n| \\ y_{n+1} &= x_n\end{aligned}$$

(erzwungene mehrdimensionale Abbildung)

Lorenz-Modell (Chaos in Atmosphäre) (siehe Wikipedia)

Pendel mit Dämpfung

Zur Henon-Abbildung und zum Lebkuchenmann. Zur Vollständigkeit wird das Lorenz-Modell angegeben:

Benutzt zur Modellierung des Chaos' in der Atmosphäre. Allgemein beschreibt es die Schicht einer Flüssigkeit, die von unten geheizt wird.

Bild:   $T_{<}$

Flüssigkeit

innerhalb der Flüssigkeit ergeben sich Zirkulationen

  $T_{>}$

Name: Rayleigh-Benard-Zelle

Gleichungen:

$$\dot{x} = -\sigma x + \sigma y$$

$$\dot{y} = -xz + rx - y$$

$$\dot{z} = xy - bx$$

x - Flussgeschwindigkeit auf dem Kreis y - Temperaturdifferenz zwischen Aufwärts- und Abwärtsbewegung z - Temperaturabweichung vom Gleichgewicht Internet: *proportional zur Abweichung des vertikalen Temperaturprofils von seinem Gleichgewichtswert*  
r - Radius der Zirkulation

## 6.8 Pendel mit Dämpfung und oszillierender Kraft

Modellbeschreibung (eigentlich ein Bild)

- Pendel mit  $\theta$
- Gravitationskraft
- treibende Kraft: Aufhängung bewegt sich mit  $2A \cos(\omega t)$

$\Rightarrow$

$$\ddot{\theta} = \gamma \dot{\theta} - (\omega_0^2 + 2A \cos(\omega t)) \sin(\theta)$$

Entspricht nicht exakt dem Vorgehen in Kapitel 6, da wir bisher diskrete Systeme untersucht haben.

- $A = 0$ : stabiler Attraktor  $x = 0, v = 0$
- $A \leq A_c$ : stabiler Attraktor
- $A > A_c$ : instabil



Es ist sinnvoll, jeweils nach der Periode  $T$  den momentanen Punkt im Phasenraum zu betrachten.  $\Rightarrow$  Poincare-Darstellung

$$\dot{\theta} \text{ vs. } \theta \text{ für } t_n = nT \text{ mit } n \in \mathbb{N}$$

PoincareApp:

- Damped Driven Pendulum
- Einschwingvorgang berücksichtigen

Periode

- $\pi$  für  $A \leq A_c$
- $2\pi$  für  $A \in [A_c, 0.71]$
- $\pi$  für  $A \in [0.72, 0.79]$
- $2\pi$  für  $A > 0.8$  (Pendel rotiert)

Weitere Periodenverdopplungen und Feigenbaumkonstante sind auffindbar.  
Offensichtlich: Zwei Attraktoren (rechts und links herum) Fragestellungen:

- Wie sieht das Einzugsgebiet aus?
- Gibt es zusammenhängende Gebiete?
- Ist der Rand glatt?
- Es gibt den instabilen Attraktor, bei dem das Pendel rotiert (*sehr spezielle Eigenschaft*)

### 6.8.1 Kreis-Abbildung

Simuliert das getriebene, gedämpfte Pendel durch eine diskrete Abbildung (siehe oben)

$$\theta_{n+1} = (\theta_n + \Omega - \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi\theta_n)) \mod 1$$

$$\Omega = \frac{\omega_0}{\omega}$$

$$\frac{K}{2\pi} \sim A(\text{Kontrollparameter})$$

$\mod 1$ , um das Überspringen darstellen zu können

$\Omega$  beinhaltet Anregungsfrequenz  $K$  - Kopplung (beinhaltet Stärke der Anregung)

**Winding Number/Windungszahl**

$$W = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m \Delta \theta_n$$

W zählt das Überschlagen des Pendels ab

W konvergiert immer. Es ist unter Anderem ein Maß für die Frequenz.

- $K=0$ ,  $\Omega$  rational:  $W = \Omega$ , Periodische Trajektorie
- $K=0$ ,  $\Omega$  irrational:  $W = \Omega$ , Quasiperiodische Trajektorie
- $0 < K < 1$ :  $W \neq \Omega$   
 Variiert man das  $K$ , so tauchen für einen Bereich von rationalen  $\Omega$ -Werten Plateaus von  $W$ -Werten auf.  
 Bezeichnung: *Mode-Locking*.  
 In einem  $W$ - $K$ - $\Omega$ -Plot ergeben sich ebenfalls Plateaus in der  $K$ - $\Omega$ -Zone.  
 Name: Arnold-Zungen.
- $K = 1$ : nur periodische Trajektorien,  $W(\Omega)$ : Teufelstreppe

**6.9 Hamilton'sches Chaos**

Hamilton-Funktion  $H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\{q_i\})$

Dadurch lassen sich komplexe ( $\rightarrow$ Radons) und reguläre ( $\rightarrow$ langweilige) Systeme beschreiben.

Reguläre Dynamik: Für jeden Freiheitsgrad lassen sich unter Umständen Erhaltungsgrößen finden (über Erhaltungssätze). Somit ist das System *integrabel*.

viele Freiheitsgrade: System *kann* chaotisch werden.

gemischte Systeme: Verhalten hängt von Anfangsbedingungen ab.

Beispiel: Rotator, periodisch angestoßen

- Stange, ausgelenkt um Winkel  $\theta$
- Schwerkraft
- periodischer Kraftstoß  $k/L$  (realisiert über  $\delta$ -Funktion)

$$H = \frac{p_\theta^2}{2I} + k \cos \left( \theta \sum_n \delta(t - n\tau) \right)$$

$$\dot{p}_\theta = k \sin(\theta) \sum_n \delta(t - n\tau)$$

$$\dot{\theta} = p_\theta / I$$

Von Interesse: Punkte im Phasenraum für periodische Zeiten  $T = n * \tau + 0^+ \ 0^+ -$  -  
 abweichende kleine Veränderung

### 6.9.1 Standardabbildung

$$\theta_{n+1} = \theta_n + p_n \mod 2\pi$$

$$p_{n+1} = p_n + k \sin(\theta_{n+1})$$

$$\tau/T = 1$$

Doppelpendel:

- $\theta_1, \theta_2, m_1 = m_2 = m, l_1 = l_2 = L$
- Darstellung in x-y-Ebene
- reibungsfrei

$$x_1 = L \sin(\theta_1)$$

$$x_2 = x_1 + L \sin(\theta_2)$$

$$y_1 = 2L - L \cos(\theta_1) \quad (y_2 = 0, y_1 = L : \text{Pendel hängt durch})$$

$$y_2 = y_1 - L \cos(\theta_2)$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m L^2 \left[ 2\dot{\theta}_1^2 + \dot{\theta}_2^2 + 2\dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \right]$$

$$E_{pot} = mgL [3 - 2\cos(\theta_1) - \cos(\theta_2)]$$

$$q_1 = \theta_1$$

$$q_2 = \theta_2$$

$$p_1 = mL^2 \left[ 2\dot{\theta}_1 + \dot{\theta}_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \right]$$

$$p_2 = mL^2 \left[ \dot{\theta}_2 + \dot{\theta}_1 \cos(\theta_1 - \theta_2) \right]$$

Betrachtung einer Phasenraumfolie Man sieht ein gemischtes System: ein Punkt führt zum Chaos, ein Anderer zu periodischem Verhalten, obwohl identische Parameter genutzt werden.

## 7 Zufallsprozesse

*Arithmetische Methoden können keine Zufallszahlen generieren*  
- Von Neumann

### 7.1 Zufallszahlenfolgen

⇒ Es gibt nur Pseudozufallszahlen, sofern ein deterministisches System diese generiert.  
Vorraussetzungen an einen Zufallszahlengenerator

- effizient (viele Zufallszahlen in kurzer Zeit)
- maschinenunabhängig
- Folge der Zufallszahlen reproduzierbar  
(Zur Wiederholung und zum Vergleich numerischer Experimente)
- Folge sollte statistische Tests erfüllen

Eine unendliche Folge ist zufällig, wenn die darin enthaltenen Informationen unendlich sind. Damit muss auch jede endliche Folge darin enthalten sein.

→ Es gibt keinen Beweis, dass eine Folge zufällig ist. Das Gegenteil ist jedoch beweisbar. Somit verbleiben ausschließlich die statistischen Tests zur stichprobenartigen Überprüfung der Zufälligkeit.

#### 7.1.1 Linear Congruential Method (LCM)

$$x_0 \neq 0$$

$$x_n = ax_{n-1} + c \mod m$$

$$r_n = x_n/m \in [0, 1)$$

m - Maximale Periode

simples Beispiel: a=3, c=4, m=32,  $x_0 = 1 \Rightarrow$  Periode 8  
a=2416, c=374441, m=1771875  
⇒ Periode m, RNG *ordentlich*  
a=65539, c=0, m=2<sup>31</sup> ⇒ IBM-RANDU, besteht nicht alle statistischen Tests

c=0 ⇒ Multiplicative linear congruential method  
Es ist geschickt, Primzahlen für m zu wählen. z.B. 2<sup>31</sup> - 1

a=1277, m=131072 ⇒ guter Start, nach einiger Zeit *sehr schlecht*  
a=16807, m=2<sup>31</sup> - 1 ⇒ IBM-SURAND, minimal standard (auch schlecht, aber besser als RANDU)

### 7.1.2 Generalized Feedback Shift Register Method

Basieren auf Bitmanipulationen.

einfachstes Beispiel:

$$x_n = x_{n-p} \text{ XOR } x_{n-q}$$

angeblich gute Werte für (p, q): (31, 3), (250, 103; aka. R250), (512, 168)  
eigentlich sollte der Generator sehr effizient sein, aber wir müssen die letzten Zahlen speichern und vor Allem vorher durch einen anderen RNG initialisieren.

allgemeiner:

$$x_n = c_1 x_{n-1} \text{ XOR } \dots \text{ XOR } c_i x_{n-i}$$

$c_i = 0, 1$ ; treffen also nur einen Auswahl

Tanswrthe 1965 als TRNG in einigen Bibliotheken vorhanden

Periode: maximal  $2^{p-1}$  R250  $\rightarrow 2^{249}$

Vorteile:

- hohe Perioden
- schnelle Berechnung

Nachteile:

- Initialisierung aufwendig
- Qualität hängt von Initialisierung ab
- keine guten Zufallsfolgen garantiert

### 7.1.3 Weitere Methoden

- Shuffle-Methoden  
Zufallszahlen generieren, eine herausuchen und daraus neue Zufallszahl generieren
- echte RNGs  
basieren auf physikalischen Prozessen (Geigerzähler)  
viele sind jedoch nicht unvoreingenommen (Münzwurf: wirklich 50/50?)  
Ausgleich per Post Processing möglich  
optische Generatoren (auch als PCI-Karte)
- Marsaglia-Methode: multiply with carry  
 $x_0 = 123456$   
 $x_1 = 123 + 456 * 672$   
 $= 306555$   
 $\rightarrow 555$  output  
 $x_2 = 306 + 555 * 672$   
 $= 373266$   
 $\rightarrow 266$

...

Periode 335999

anderes Beispiel:

 $a = 30903$  $m = 2^{16}$ Periode:  $> 2^{29}$ 

### 7.1.4 Tests

1. Periodizität

2. Gleichmäßigkeit

Histogramm

m Töpfe, mit  $m_i$  Zufallszahlen, so dass  $\sum_{i=1}^m m_i = N$ 

erwartete Wahrscheinlichkeit:

$$P_i = \int_{a_i}^{b_i} p(x) dx (= b_i - a_i = 1/M)$$

d.h.  $Np_i$  im Mittel im i-ten Topf, aber nur im Mittel!

übliche Annahme: Normalverteilung (eigentlich Binomialverteilung, aber große Zahlen)

 $m_i$  fluktuieren um  $Np_i$  mit  $\sigma = \sqrt{Np_i}$ 3.  $\chi^2$ -Test misst Abweichung von der gewünschten Verteilung

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^M \frac{(m_i - Np_i)^2}{Np_i}$$

Übereinstimmung beurteilt nach Signifikanzniveau  $\alpha$  und ist abhängig von der Zahl der Freiheitsgrade  $\nu$ hier:  $\nu = M - 1$  (eine Nebenbedingung)  $\chi^2$ -Verteilung:

$$P_{\chi^2, \nu} = \frac{(\chi^2)^{\nu/2-1} e^{-\chi^2/2}}{2^{\nu/2} \Gamma(\nu/2)}$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$$

$$\Gamma(1) = 1$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\int_{\chi^2(\alpha)}^{\infty} P_{\chi^2} d\chi^2 (= Q(\chi^2|\nu)) = \alpha$$

Maximum bei  $\chi^2 = \nu - 2$ Standardabweichung  $\sqrt{2\nu}$

okay, wenn  $\chi_{\text{messen}}^2 < \chi^2(\alpha)$

Die entsprechenden Zahlen stehen in Tabellen

Ein Problem: Derartige Analysen werden in vielen Bereichen verwendet, so dass es keinen gemeinsamen Nenner gibt. Deshalb: Q (siehe oben)

4. Spektraltest Paare oder Tripel zeichnen.  
Ergeben sich klare Linien, gibt es Probleme. Eigentlich sollten die Punkte gleichverteilt sein.
5. Im Integral: Anteil der leeren Histogrammtöpfe  
sollte dem radioaktiven Zerfall entsprechen :  $\sim e^{-t}$
6. Korrelationen ausrechnen  
wie Spektraltest, aber mit weiter entfernten Paaren
7. Autokorrelationsfunktionen

$$C(k) = \frac{\langle x_{i+k}x_i \rangle - \langle x_i \rangle^2}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2}$$

## 7.2 Monte-Carlo-Algorithmus

Herkunft: Name eines US-Projektes im zweiten Weltkrieg

Idee: Zufällige Ausführung des wahrscheinlichsten Prozessschrittes.

⇒ BoxApp

- geteilter Kasten
- N Teilchen auf einer Seite
- Sprung eines zufälligen Teilchens auf die andere Seite
- Zeitliche Abhängigkeit plotten
- Gleichgewicht bei N/2 auf einer Seite

besserer Algorithmus:

- wähle r zufällig
- $r \leq p = n/N \Rightarrow n = n - 1$
- $r > p \Rightarrow n = n + 1$

### 7.2.1 Fluktuationen

$$\begin{aligned}
 \sigma_n^2 &\equiv \langle \Delta_n^2 \rangle \equiv \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle \\
 &= \langle n^2 \rangle - 2 \langle n \rangle \langle n \rangle + \langle \langle n \rangle^2 \rangle \\
 &= \langle n^2 \rangle - 2 \langle n \rangle \langle n \rangle + \langle n \rangle^2 \\
 &= \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2
 \end{aligned}$$

$\sigma_n / \langle n \rangle$  - relative Größe der Fluktuationen

Begriff: Messung Ein MC-Versuch

$$\langle n \rangle_{t+1} - \langle n \rangle_t = (-\langle n \rangle_t / N + (N - \langle n \rangle_t) / N) * \Delta t$$

Klammer rechte Seite:  $-p/n + (1-p)/N$

$$\Delta t \rightarrow 0 \Rightarrow \dot{\langle n \rangle}_t = 1 - 2 \langle n \rangle_t / N$$

Anfangsbedingung:  $\langle n \rangle_{t=0} = N$

$$\langle n \rangle_t = N/2(1 + e^{-2t/N})$$

Relaxationszeit  $\tau$ :

Abnahme von  $\langle n \rangle_t - N/2$  auf  $\frac{1}{e}(\langle n \rangle_{t=0} - \frac{N}{2})$

Methode: exaktes Abzählen

Beispiel:  $N=8$

$t$	$p * n$	$\langle n \rangle$
0		8
1	$8 \times 7$	7
2	$7 \times 6$	
	$1 \times 8$	6.25
3	<i>unübersichtlich</i>	

## 7.3 Zufallspfade (Random Walk)

Anwendungen: Diffusionen, Teilchenbewegungen, Konstruktion von Polymerketten (Nobelpreis), Besoffener Seemann.

Linearer Zufallspfad  $d = 1$  Schrittweite  $a$   $p$  Wahrscheinlichkeit, nach links zu gehen  $q$  nach rechts (oft  $q = 1-p$ )

Schritt  $s_i = \pm a$

Position nach  $N$  Schritten

$$x_N = \sum_{i=1}^N s_i$$

$$\langle x \rangle \equiv \langle x_N \rangle = \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle = N \langle s \rangle = N(pa + q(-a)) = N(p - q)a$$



$q = 1 - p \Rightarrow \langle x \rangle = 0 \Rightarrow$  kein gutes Maß  
 besseres Maß: **End-zu-End-Abstand**

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &\equiv \langle \Delta_x^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ &= \langle \left( \sum_i s_i - \langle s \rangle \right) \left( \sum_j s_j - \langle s \rangle \right) \rangle \\ &= \langle \left( \sum_i s_i - \langle s \rangle \right)^2 \rangle + \langle \sum_{i \neq j} (s_i - \langle s \rangle) * (s_j - \langle s \rangle) \rangle \\ &= N(\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2) + \sum_{i \neq j} \langle s_i - \langle s \rangle \rangle \langle s_j - \langle s \rangle \rangle\end{aligned}$$

in der Summe: beide = 0

$$N(a^2 - (p - q)^2 a^2) = Na^2 4pq$$

$\Rightarrow$  Varianz (End-zu-End-Abstand) hängt im Wesentlichen von N ab. Der Abstand selbst ( $\sigma_x$ ) wächst mit der Wurzel der Schritte. Man kommt beliebig weit, benötigt aber viele Schritte.

OSP: WalkerApp HistogramFrame append() Hashtable

$P_N(x)$ : Wahrscheinlichkeit, mit N Schritten bei X anzukommen

$$P_N(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\sigma_x^2}}$$

Abstand von  $\vec{r}_0 = (0, 0) : R$

$$\begin{aligned}\sigma_R^2 &= \langle R^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle \\ &= \sigma_x^2 + \sigma_y^2\end{aligned}$$

in 1 Dim:

$$R^2 = \langle x^2 \rangle = Na^2 \text{ für } p = q = \frac{1}{2}$$

Skalengesetz  $\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu}$  hier:  $\nu = \frac{1}{2}$

Wie prüft man seine numerische Simulation auf  $\langle R^2 \rangle$ ?

- fit  
 doppel logarithmische Skala  
 linearer fit  
 Prüfung auf Anstieg  $2\nu$

- $R^2(N) = AN^{2\nu}$

$$R^2(N-10) = A(N-10)^{2\nu}$$

$$\ln \frac{R^2(N)}{R^2(N-10)} = \ln \left( \frac{N}{N-10} \right)^{2\nu} = 2\nu \ln \frac{N}{(N-10)}$$

$$< R^2 > = 2dDN$$

D - Selbstdiffusionskonstante

d - Dimension

d=2  $\Rightarrow$  4DN  $\Rightarrow$  Gittergas

Cain: Standardfehler

$$\sigma_x = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

$\sigma_x$  drückt Abweichung zwischen  $\bar{x}$  und  $\mu$  (gemessener und analytischer Mittelwert) aus.

Nachteil:

- komplette Zeitreihe nötig
- unpraktische Formulierung
- komplette Neuberechnung bei jedem Zeichenschritt nötig

Anpassung:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 &= \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i=1}^N 2x_i\bar{x} + \sum_{i=1}^N \bar{x}^2 \\ &= \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2\bar{x} \sum_{i=1}^N x_i + \left( \sum_{i=1}^N 1 \right) \bar{x}^2 \\ &= \sum_{i=1}^N x_i^2 - N\bar{x}^2 \end{aligned}$$

$$< (x_i - \bar{x})^2 > = < x_i^2 > - < x_i >^2$$

Gaußverteilung

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\bar{x}}{\sigma}\right)^2}$$

Diffusionskonstante anhand des Zufallswanderers erklärt:

$$P(i, N) = \frac{1}{2} [P(i+1, N-1) + P(i-1, N-1)]$$

i - Ort N - Zeit

$$t = N\tau$$

$$\Delta x = a \text{ (Schrittweite des Zufallspfades)}$$

$\Rightarrow$

$$P(i, N) = aP(x, t)$$

$$P(x, t) = \frac{1}{2}[P(x + a, t - \tau) + P(x - a, t - \tau)]$$

Operationen:  $-P(x, t - \tau)$  und  $\times \frac{t}{\tau}$

$$\frac{1}{\tau} (P(x, t) - P(x, t - \tau)) = \frac{a^2}{2\tau} \frac{P(x + a, t - \tau) - 2P(x, t - \tau) + P(x - a, t - \tau)}{a^2}$$

$$\tau \rightarrow 0, a \rightarrow 0$$

$$D = \frac{a^2}{2\tau}$$

D - Selbstdiffusionskonstante, endlich.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

Diffusionsgleichung

3 Dimensionen:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \nabla^2 P - v \frac{\partial P}{\partial r}$$

Terme: Diffusion und Drift

Im Buch: Anhang 7

Parabolische Differentialgleichung (wegen quadratischer Ableitung) Normalerweise ein nichttriviales Problem Lösung per Monte Carlo, genauer: Crank-Nicholson-Methode

Stichwort: Mastergleichung

### 7.3.1 Varianten des Zufallspfades

- beschränkter Zufallspfad (Restricted Random Walk)  
 Bsp: Regentropfen in der Atmosphäre (trifft Boden)  
 In unserer Physik: Halbleiter, in dem elektronische Anregungen beobachtet werden, welche in Fallen (Störstellen) verschwinden.  
 In einfachster Modellierung: eindimensionale Kette, auf der Fallen verteilt sind.  
 Wir betrachten die Bewegung der Anregungen und damit den Transport in solchen gestörten Halbleitern.  
 In einfachster Variante lässt es sich abzählen.  
 Bestimmung von Abklingzeiten, Anzahl der Schritte.  
 $\tau = \frac{1}{2} D x_0 (L - x_0)$  für 2 Fallen an 1 und L

- persistent random walk  
Richtung mit  $\alpha$  erhalten  
 $1 - \alpha$  umgekehrt  
typische Werte:  $\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$   
 $\langle x \rangle = 0$ , trotz Persistenz  
 $\sigma_x^2 \sim N^{2\nu}$  mit  $\nu \neq \frac{1}{2}$   
Es gibt einen Zusammenhang zwischen  $\alpha$  und  $\nu$   
Was folgt für die Selbstdiffusionskonstante?  
Anwendungen: Chromatografie (Simulation eines Moleküles)
- synchronisierter Random Walk  
Bewegungen zwischen zwei Random Walks werden synchronisiert
- Kontinuumsmodelle  
sehr alt, geht auf Herrn Rayleigh 1919 zurück  
Relevant für Polymerphysik  
Beispiel:  
 $a=1$ , aber kontinuierliche Winkel  
End-Zu-End-Abstand ( $= \sigma_x^2$ ) ist wieder  $\sim N^{2\nu}$   
andere Beispiele:

$$f(a) = Ce^{-a} \text{ für } a > 0$$

$$f(a) = C \frac{1}{a^{1+\alpha}} \text{ mit } \alpha \leq 2 \text{ (üblicherweise)}$$

$\Rightarrow$  Levy-Flight

## 7.4 Verteilungen

### 7.4.1 Zentraler Grenzwertsatz

Zufallsvariable  $x$

Wahrscheinlichkeitsdichte  $p(x)$

m-tes Moment:

$$\langle x^m \rangle = \int x^m p(x) dx$$

-  $m=1$ : Mittelwert (oft  $\mu$ )

-  $m=2$ : Varianz  $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

zentrale Momente:

$$\mu_m = \int (x - \mu)^m p(x) dx$$

-  $\mu_0 = 1$  (Norm)

-  $\mu_1 = \mu$

-  $\mu_2 = \sigma^2$

-  $\mu_3 = \gamma_3 \sigma^3$

$\gamma_3$  - Asymmetrie der Verteilung (Skewness)

-  $\mu_4 = (\gamma_4 + 3) * \sigma^4$

$\gamma_4$  - Kurtuosis (excess): Quantifizierung der Schärfe

+3 - Potenzen dritter Ordnung werden entsorgt

Median:  $\mu_{\frac{1}{2}} : p(x < \mu_{\frac{1}{2}}) = p(x > \mu_{\frac{1}{2}})$

Wahrscheinlichster Wert: (nicht Mittelwert):  $p(x = \mu_{max}) > p(x \neq \mu_{max})$

FWHM: Full Width at Half Maximum (*Halbe Breite* im Laborslang)

$\sigma = \frac{1}{2}FWHM$  für Lorentz-Verteilung

$1.177\sigma = \frac{1}{2}FWHM$  für Gauß

## 7.4.2 Gesetz der großen Zahlen

(n soll groß sein)

$$y = y_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \text{ neue Zufallsvariable}$$

Wichtig: Die Messungen der  $x_i$  sind unabhängig.

$p(y)$  Gaußverteilung mit  $\sigma_y \approx \sigma_x / \sqrt{n}$  wenn:  $p(x)$  besitzt 1. und 2. Moment

$$\sigma_y^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$$

Gegenbeispiel:

Lorentz-Verteilung

Breit-Wigner-Verteilung  $p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{s}{s^2 + (x-t)^2}$

Cauchy-Verteilung

(alle drei das selbe)

Deshalb wird sehr häufig die Gaußverteilung angenommen, wenn nichts genaueres über das untersuchte System bekannt ist.

Wichtiges Beispiel aus Schreiber's Postdoc-Zeit:

$$y = \sum_{i=1}^{12} r_i$$

$r_i$  gleichverteilt

liefert im Prinzip eine Gaußverteilung mit  $\langle y \rangle = 6$  und  $\sigma_y = 1$ . Eine der numerisch schnellsten Methoden für Gaußverteilungen.

Blöd: Die großen Ausläufer erhält man damit nicht. Größter und kleinster Wert sind hier stark eingeschränkt.

Besser: Box-Muller

## 7.4.3 Poisson-Verteilung

Beispiel:

- Zielscheibe mit M Zellen
- Pro Wurf wird eine Zelle zufällig gewählt
- $P(n)$ : Wahrscheinlichkeit, dass eine Zelle n-mal getroffen wird:

$$P(n) = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle}$$

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^N n P(n) = N p = \frac{N}{M}$$

anderes Beispiel: Kernzerfall

## 7.5 Methode der kleinsten Quadrate

Lineare Regression

Fit:  $y = f(x) = mx + b$  an  $(x_i, y_i)$  anpassen

$i = 1..n$

$y_i$  haben Ungenauigkeit

$$d_i = y_i - f(x_i)$$

$$= y_i - mx_i - b$$

n groß: Gauß-Verteilung

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n d_i^2$$

minimieren:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial m} \stackrel{!}{=} 0$$

$$m = \frac{\langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle}{\sigma_x^2}$$

$$b = \langle y \rangle - m \langle x \rangle$$

⇒ im Allgemeinen in jeder Datenbank vorhanden

$$\sigma_m = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\Delta}{\sigma_x}$$

$$\sigma_b = \sigma_m \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

$$\Delta^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n d_i^2$$

wenn  $y_i$  unterschiedliche  $\sigma_i$

Gewichte  $w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n w_i d_i^2$$

$$\langle y \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n w_i y_i}{\sum_{i=1}^n w_i}$$

Das ist in der Regel nicht in jeder Datenbank vorhanden. Man kennt ohnehin die Ungenauigkeiten nicht, weshalb man davon ausgeht, dass sie gleich sind.

*Mit vier Parametern kann man einen Elefanten fitten. Mit einem fünften kann er mit dem Schwanz wackeln. - Dirac*

### 7.5.1 Bewertungsmöglichkeiten der Fits

- Korrelationskoeffizient  $r_{x,y}$   
 $\chi^2$ -Verteilung für  $\nu$  Freiheitsgrade
- Student's t-Test  
Name basiert auf Spitznamen des Autors Gossett (oder so)
- uU quadratischer Fit  
Prüfung über  $\chi^2$  möglich, wobei die Freiheitsgrade weiter reduziert sind  
Alternative: Fischer's F-Test

allgemein:

$$y = f(a_1..a_m, x) \text{ an } (x_i, y_i)$$

$$d_i = y_i - f(x_i) \text{ für viele Messungen}$$

$$f_i = f(a_1..a_m, x_i)$$

$y_i$ : Mittelwert  $f_i$

Breite  $\sigma_i$

$$p(y_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} e^{-\frac{d_i^2}{2\sigma_i^2}}$$

Likelihood-Methode:

$$\mathcal{L}(a_1..a_m) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} e^{-\frac{1}{2}\chi^2}$$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{d_i^2}{\sigma_i^2}$$

Maximum von  $\mathcal{L} \rightarrow$  wahrscheinlichste  $a_k$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_k} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = 0 \text{ für } k = 1..m$$

$\Rightarrow$

$$-2 \sum_{i=1}^n \frac{d_i}{\sigma_i} \frac{\partial f_i}{\partial a_k} = 0$$

Auch bei quadratischen Fits: *Multiple Linear Regression linear*, da das  $a$  linear ist. Die Potenz von  $x$  ist uninteressant. Ein Quadratischer Fit ist eine lineare Anpassung.

Beispiel:

$$y = \sum_{k=1}^m a_k f_k(x)$$

nicht linear in  $x$ , linear in  $a_k$

$$\max(\mathcal{L}) \Rightarrow \frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\partial f_i / \partial a_j = \partial \sum_{k=1}^m a_k f_k(x_i) / \partial a_j = f_j(x_i)$$

$\Rightarrow$  lineares Gleichungssystem.  $n$  Gleichungen mit  $n$  Unbekannten.

Die  $a_k$  sind oftmals nicht linear unabhängig.

## 7.6 Chemische Reaktionen

erstes Beispiel:  $A + A \rightarrow 0$  im abgeschlossenen System  
Konzentration  $A(t)$

$$\dot{A} = -kA^2$$

$$A(t) = \frac{A(0)}{1 + ktA(0)}$$

$\rightarrow$

$$A(t) \sim 1/t$$

zweites Beispiel:  $A + B \rightarrow 0$

$$\dot{A} = \dot{B} = -kAB$$

Für Fit  $1/A(t) - 1/A(0)$  in Abh. von  $t$  Doppelt logarithmisch auftragen. zufällige Anfangsverteilungen  $\rightarrow$  Nächster-Nachbar-Abstand  $r$

$$P(r, t = 0) = 2Ae^{-2A(r-1)}$$

Interessante Größe:  $D(t)$ : Anzahl der Plätze, die von einem Random Walker besucht werden.



## 7.7 Variationsmethoden

### 7.7.1 Fermat'sches Prinzip

geometrische Optik von vor einigen hundert Jahren.

Das Prinzip besagt, dass der Lichtstrahl den Weg mit der kleinsten Laufzeit nimmt. Damit kann man nachweisen, dass der Einfallswinkel  $\theta_i$  dem Ausgungswinkel  $\theta_f$  entspricht. (initial und final)

Brechungsindex  $n$ :  $v = c/n$  Somit wird keine gerade Linie angenommen, sondern ein an der Grenzfläche gebrochener Weg.

FermatApp

- N Schichten mit Brechungsindizes  $n_i$
- $n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2)$

### 7.7.2 Prinzip der kleinsten Wirkung

$$L = E_{kin} - E_{pot}$$

$$S = \int_{t_0}^{t_f} L dt$$

minimal  $\Rightarrow$  Weg im 2. Newtonschen Gesetz (für konservative Kräfte)

Diskretisierung  $S \approx \sum_{i=1}^{n-1} L(t_i) \Delta t$

Gesucht: Weg von  $x(t_0)$  nach  $x(t_f)$

Metropolis Monte Carlo zur Anpassung

## 7.8 Polymere

self-avoiding random walk (SAW)

$$\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu}$$

$\nu = 0.75$  in 2D

$\nu \approx 0.5874..$  in 3D

*excluded volume*

SAW in 2D: beliebiges  $(x_0, y_0) = (0, 0)$

1. Schritt:  $(x_1, y_1) = (1, 0)$

nächster Schritt: 3 Möglichkeiten (u.U.  $< 3$ )

Wenn Selbstwechselwirkung (d.h. schon besetzter Platz soll wieder erreicht werden vom Zufallspfad), dann neuer Pfad

$$Z(N) \approx e^{-aN}$$

Z - Anzahl erfolgreicher Pfade

in 2D: im Mittel effektiv 2.63385 Möglichkeiten

Erfolgsrate: Zustandssumme  $Z(N) \rightarrow C_0 * 2.6385^N N^{\gamma-1}$  (De Gennes)

Diamantgitter:  $N=100$  3%

Käfigeffekt: Man landet in einem vollständig umschlossenen Punkt auf dem Gitter, so dass keine weiteren Schritte möglich sind

Andere (stärkere) Einschränkung: Keine geraden Linien (nur  $\pm 90^\circ$  erlaubt) Meist zwei Möglichkeiten des Random Walks im nächsten Schritt Manchmal muss man dazu den Pfad umdrehen, da nur ein Schritt möglich ist. Es gibt aber auch hier doppelte Sackgassen. Erfolgsrate von über 90%

Ganz zum Abschluss noch ein Ausflug in die Dynamik:

(Bild mit grüner Linie und quadratgitterartig angeordneten Kreisen auf dem Projektor) Idee: Die Kette darf sich verändern. Wir untersuchen die Möglichkeiten der Kette, sich legal zu ändern. Es können einzelne Kettenglieder verschoben werden, ohne die Kette zu unterbrechen.

Im Beispiel gibt es 5 Möglichkeiten für die Dynamik.

*Das ist die einfachste Variante, die Bewegung von Ketten zu simulieren; Hier beschränkt auf die einzelne Kette*

Mit dieser Simulation kann man auch die Verknäuelung einer Kette (zB DNA) simulieren. Sinnvoller Weise müssen wir Parameter einführen, die die Kette quantifizieren (zB Wechselwirkungsenergien)

## 8 Dynamik von Vielteilchensystemen

Beschreibung einzelner Moleküle durch Newtonsche Gesetze.

Begriff: Molekulardynamik (MD)

### 8.1 Intermolekulare Potentiale

Im Allgemeinen betrachten wir Moleküle als Kugel. In Ausnahmefällen werden einzelne Molekülteile oder Atome als Kugel angenommen.

Wir beschränken uns auf Paarwechselwirkungen mit radialer Abhängigkeit.

Potential:

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1+1}^N u(r_{ij})$$

Standardbeispiel: Flüssiges Argon

Erste MD-Simulation: 1964 Vorher: Harte Scheiben/Feste Kugeln

u und/oder U werden im Allgemeinen aus der Quantenmechanik berechnet, oft aber auch phänomenologisch.

Bekanntes Potential: LJ-Potential

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Parameter oft in reduzierten Einheiten.

$$\Delta_t \approx 10^{-1}$$

$$t \sim 10 \cdot 10^4$$

Schwache Anziehung (Ladungen, van der Waals-Potential) und Starke Abstoßung (Pauli-Prinzip) Die steile Kurve mit  $r^{-12}$  ist so nicht begründbar, hat sich jedoch bewährt.

### 8.2 Numerischer Algorithmus

Erhaltungssätze gelten

Umkehrbarkeit gilt

Wir wählen einen symplektischen Algorithmus. Das Beste für uns: Velocity Verlet

Oberflächeneffekte sind hier besonders wichtig. Viele Teilchen haben keine Wechselwirkung mit einem Nachbarn in Richtung der Oberflächennormalen. Man sollte periodische Randbedingungen benutzen.

Bei längerer Potentialreichweite als Raumgröße muss man tricksen. Langreichweitige Sachen im Impulsraum rechnen und so ein Spaß

Beschränkung auf Minimum Image Convention:

max. Abstand für U:  $L/2$

L - Systemgröße

d.h.  $u = 0$  für  $r > L/2$

In OSP: `PBC.position()` und `PBC.separation()`

## 8.3 MD-Programm

2D Startwerte für vorgegebenes T pro Freiheitsgrad  $\langle E_{kin} \rangle = \frac{1}{2} k_B T$

$$k_B T = \frac{2}{d} \frac{\langle E_{kin} \rangle}{N} = \sum_i m_i \vec{v}_i^2$$

d - Dimension N - Teilchen

`setVelocities()`  $v_i$  werden zufällig gewählt, so dass sie die Temperaturbedingung erfüllen.

`setRandomPositions()` Gut für dünne Gase, aber maximale Dichte, da der repulsive Anteil überwiegt und die Numerik zerreißt. Möglicher Ausweg: Vorerst eine zusätzliche Reibung einführen. `setRectangularLattice()` Die Atome werden auf die Positionen eines rechteckigen Gitters gesetzt. Durch hohe Geschwindigkeiten schmilzt das Gitter.

Man sollte mit Anfangsbedingungen vorsichtig sein und in Frage stellen, ob man dem System durch die Anfangsbedingungen keine ungewollten Artefakte aufzwingt.

`computeAcceleration()`: LJ ist kurzreichweitig: Cutoffreichweite Bei wenigen Teilchen und kleinen Systemen kann die Prüfung der Cutoffreichweite mehr Rechenzeit kosten als sparen. `getRate()`: ein Mal merken für den nächsten Schritt, da Verlet die Funktion doppelt aufruft. `getMeanTemperature()` `getMeanEnergy()` (== const?) `getMeanPressure()` `getHeatCapacity()` `resetAverages()` Zur Prüfung des Einschwingverhaltens `drawMethod()` `LJparticles` `LJparticlesApp`

Untersuchung des Gleichgewichtes Dichte und Energie für eine Konfiguration speichern und später als sinnvolle Startkonfiguration auswählen. Damit vermeidet man die erneute Relaxierung.  $\Rightarrow$  `LJParticlesLoader`

Test für das Gleichgewicht: Man geht von einer extremen Anfangskonfiguration aus (zB alle Teilchen in der linken Hälfte) und betrachtet, wie sich diese Teilchen im gesamten System verteilen. Wenn diese Anfangsbedingung zur selben Konfiguration wie beispielsweise ein Gitter führen, sind wir auf der sicheren Seite.

auf makroskopischer Skala ist das eigentlich konservative System plötzlich nicht mehr zeitumkehrinvariant. Das ist blöd, aber Numerik.

### 8.3.1 Tests

$E_{tot}$  erhalten?

$$\Delta E(t) = |E_{tot}(t) - E_{tot}(0)|$$

$$\max(\Delta E) \sim \Delta t^2$$

(weil Verlet zweiter Ordnung ist) (für festes  $t$  (gleiche Gesamtzeit))

$E(t)$ : Gerade anpassen  $\rightarrow$  Drift Daumenregel: akzeptabel, wenn von Ordnung  $e-4$

Natürlich auch Fluktuationen als Rauschen (gegeben durch Energievarianz)

## 8.4 Berechnung der Mittelwerte

### 8.4.1 Temperatur T

$$k_B T = \frac{1}{d(N-1)} \sum_{i=1}^N m_i \overline{v_i^2}$$

Summe:  $p_{tot} = 0$

Balken: Zeitmittelwert

### 8.4.2 Druck P

Kraft pro Fläche

$$PV = Nk_B T + \frac{1}{d} \sum_{i < j} \vec{r}_{ij} \vec{F}_{ij}$$

Anmerkungen: id. Gas, Virialtheorem (Summe)

Virialtheorem:

$$2 \langle E_{kin} \rangle = - \sum_{k=1}^N \langle \vec{F}_k \vec{r}_k \rangle$$

$V(r) = ar \times n$  (Bsp: Schwerkraft  $n = -1$ )  $\Rightarrow$

$$2 \langle E_{kin} \rangle = n \langle E_{pot} \rangle$$

Quasi-Ergoden-Hypothese: Zeitmittel ist dem Ensemblemittel äquivalent, was toll, aber nicht selbstverständlich ist. Idee: Man erreicht über Zeitmittel und Ensemblemittel gleichermaßen alle möglichen Konfigurationen.

Uns interessiert auch die Verteilung der einzelnen Größen: Histogramm  $P(v_x)$  System ist symmetrisch, also sollten die Verteilungen in x- und y-Richtung identisch sein.

besser

$$P(u) = \frac{1}{2} (P(v_x = u) + P(v_y = u))$$

### 8.4.3 spezifische Wärme

Heat Capacity / Specific Heat

$$c_v = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Es ist die Antwort des Systemes auf die Energieänderung. Problem: MD liefert eigentlich  $T(E)$

$$c_v = \frac{\partial E}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$$

getHeatCapacity() Aus Umrechnung des Ganzen auf die Temperatur:

$$\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2 = d \frac{N}{2} k_B \langle T \rangle^2 \left(1 - \frac{d N k_B}{2 c_v}\right)$$

Diese Fluktuation drückt die Abweichung der idealen Gasgleichung aus

#### 8.4.4 Startgitterwahl

Ein Dreiecksgitter (hexgitter) ist optimaler bei simplen LJ-Potentialen, da die gesamten Wechselwirkungsenergien geringer sind. (Höhere Koordination)

setTriangularLattice()

Bei zu niedriger Temperatur erreicht man unter Umständen nicht das globale Energieminimum (zB bleibt man im Quadratgitter), so dass auch die Ergodenhypothese verletzt wird. Es werden offensichtlich nicht alle Zustände erreicht.

#### 8.4.5 Radiale Paarverteilungsfunktion

RDF, Radial Distribution Function,  $g(r)$  Kann auch experimentell bestimmt werden. Zahl der Teilchen im Abstand zwischen  $[r, r+dr]$

Aus Symmetriegründen beschränken wir es im Allgemeinen auf den Radius. Lediglich in Festkörpern werden gelegentlich andere Werte gewählt.

$$\rho \int g(r) dr = N - 1 \approx N$$

$\rho$ :  $N/V$

LJ-Potential:

$$g(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$$

$$g(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 1$$

ideales Gas:  $g(r) = 1$

Wechselwirkungsenergie

$$u(r) = \rho g(r) d\vec{r}$$

$\rho$  - lok. Dichte um ein Teilchen

$$U/N = \rho/2 \int g(r)u(r)d\vec{r}$$

N - Iteration über  $N^2$  (Teilchen-Teilchen statt Teilchen-Global) U - Gesamte potentielle Energie

$$DruckPV/N = k_B T + \rho/2d \int g(r)rdu/dr d\vec{r}$$

computeRDF()

Sind  $l_x$  oder  $l_y$  unterschiedlich, beschränkt man sich im Allgemeinen auf den Kleineren der beiden Werte.

normalizeRDF()

Es ist interessant, zu sehen, welche Strukturen auftreten.

System in zwei Dimensionen:

Substrat von äquidistanten Atomen (Abstand a)

gleichartige Atome in Dreiecksgitter mit 2a Gitterabstand darauf platziert

am linken Rand:  $F_R$  mit  $a \approx 10v$  (grob) am rechten Rand:  $F_{ext}$  als Feder, wird langsam nach rechts gezogen

Federn zwischen den aufgelegten Atomen LJ-Potentiale zwischen Substrat- und Auflageatomen

Haftreibung und so weiter. Einfach mal programmieren und staunen (mit Parametern spielen)

## 8.5 Harte Kugeln

$$u(r) = \infty \text{ für } r < \sigma$$

$$\text{endlich für } r \geq \sigma$$

r - Durchmesser, nicht Radius

Dynamik: über Stöße bestimmt.

In Simulation: elastische Zweiteilchenstöße betrachten.

Energieerhaltung:

$$\vec{v}_i'^2 + \vec{v}_j'^2 = \vec{v}_i^2 + \vec{v}_j^2$$

Impulserhaltung:

$$\vec{v}_i' + \vec{v}_j' = \vec{v}_i + \vec{v}_j$$

Eigentlich zwei ganz einfache Gleichungen. Somit ergibt sich ein einfacher iterativer Algorithmus.

$$\Delta \vec{v}_i = \vec{v}_i' - \vec{v}_i$$

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i + \vec{r}_j$$

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$

Stoß: Kraft parallel  $\vec{r}_{ij}$ , wenn  $|\vec{r}_{ij}| = 2\sigma$

Günstig, die Geschwindigkeiten in  $v_{i\parallel}$  und  $v_{i\perp}$

Vier Bedingungen:

$$\vec{v}'_{ip} = \vec{v}_{jp}$$

$$\vec{v}'_{jp} = \vec{v}_{ip}$$

$$\vec{v}'_{is} = \vec{v}_{is}$$

$$\vec{v}'_{js} = \vec{v}_{js}$$

$$\Delta\vec{v}_i = -\Delta\vec{v}_j = (\vec{v}_{ij}\vec{r}_{ij})\frac{\vec{r}_{ij}}{\sigma^2}$$

$t_{ij}$ : Zeit der Kollision von i und j

$$|\vec{r}_{ij}(t_{ij})| = \sigma$$

$$\vec{r}_i(t_{ij}) = \vec{r}_i(0) + \vec{v}_i(0)t_{ij}$$

$$t_{ij} = -\vec{v}_{ij}\vec{r}_{ij} - \frac{\sqrt{(\vec{v}_{ij}\vec{r}_{ij})^2 - v_{ij}^2(r_{ij}^2 - \sigma^2)}}{v_{ij}^2}$$

Für Simulation wichtig:

1. Bestimmen  $t_{ij}$  für alle Paare
2.  $t_{i,min} = \min_j(t_{ij})$
3.  $t_c = \min_i(t_{i,min})$  Stoßzeit (c is for cookies)
4. alle Teilchen werden um  $t_c$  weiter bewegt
5.  $t_{ij}$  werden um  $t_c$  reduziert
6. Neue  $\vec{v}$  für Stoßpartner
7. ggf. phys. Größen bestimmen
8. neue Stoßzeiten  $t_{ij}$  für alle veralteten Stoßbeziehungen

Initialisierung:

- zufällige Anfangskonfiguration, aber auf Überlapp prüfen.
- Gitter für höhere Dichten



checkCollision(): Nach Stößen auch in Nachbarzellen (periodische Randbedingungen) suchen

Relativ große Abschneidezeit bedenken.

Druck

$$\vec{F}_{ij}(t) = \vec{I}_{ij}\delta(t - t_c)$$

I - Impuls

$$\vec{I}_{ij} = m(\vec{v}_{ij'} - \vec{v}_{ij})$$

$$= m(\Delta\vec{v}_i - \Delta\vec{v}_j)$$

$$\frac{PV}{N} = k_B T + \frac{1}{dN} \frac{1}{t} \sum_{C_{ij}} m(\vec{v}_{ij'} - \vec{v}_{ij}) \vec{r}_{ij}$$

$C_{ij}$  - Stöße zwischen i und j in (0, t)

Paarkorrelationsfunktion g(r) Problem: Mittelwerte trotz variabler Zeitschritte  $t_c$

Mittlere Stoßzeit:

$$t_c = \frac{t}{2 \frac{n_c}{N}}$$

2, weil immer zwei Partner beteiligt sind

Mittlere freie Weglänge:

$$l = \sqrt{v^2} t_c$$

## 8.6 dynamische Eigenschaften

$$r_i(\vec{t}) - r_i(\vec{0}) \sim t \text{ (ohne Kräfte)}$$

im Mittel: = 0

$$\overline{R^2(t)} = \overline{(r_i(t - t_0) - r_i(t_0))^2} \\ = 2dDt$$

$\overline{sth.} \rightarrow$  Zeitmittel über  $t_0$  (verschiedene  $t_0$  betrachten)

$\Rightarrow$  computeR2() beachte periodische Randbedingungen xWrap yWrap

$\overline{R^2} \sim 4 * 0.61t$  für LJ-Potential in d=2

für dichte Flüssigkeit:

$$\overline{R^2} \sim t \text{ für große } t$$

freies Teilchen  $\overline{R^2} \sim t^2$

in d=2:  $\overline{R^2} \sim t \log t$  dominiert (effektives D)

Geschwindigkeits-Autokorrelations-Funktion

$$C(t) = \frac{1}{v_0^2} \overline{v_i(t - t_0) v_i(t_0)}$$

Mittelung über  $t_0$

$$= \overline{v_i(t_0)^2}$$

$$D = v_0^2 \int_0^\infty C(t) dt$$

$$C(t=0) = 1$$

$$C(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$$

Frage: Wie erreicht die Korrelationsfunktion dieses Abklingen?

Interessante historische Anmerkung: Für  $\rho \approx \frac{1}{2}\rho_{max}$  in d=2:  $C(t) \sim t^{-1}$  für sehr große t.

$\rho_{max}$  - dichteste Packung

Das bedeutet, dass das Integral D divergent ist.

Somit ist D nicht wohl definiert.

Dieser Effekt wurde zuerst in der Simulation gefunden.

Es hat lang gedauert, bis man das wirklich verstanden hat, aber so lange eigentlich auch nicht.

Was da passiert ist, dass die Geschwindigkeit anschaulich ausgedrückt in Wirbeln gespeichert ist.

Sie haben da Turbulenzen und diese Wirbel klingen sehr langsam ab.

Dieser hydrodynamische Effekt wurde so nie vorher gesehen und ist deshalb historisch betrachtet etwas Besonderes.

In drei Dimensionen ist das aber kein Problem, da D konvergiert ( $C(t) \sim t^{-\frac{3}{2}}$ )

## 8.7 Nachbarschaft

Zum Beispiel LJ-Potential:  $r_c = 2.3\sigma$  oder  $2.5\sigma$

Problem: Wir setzen das Potential bei  $r_c$  auf 0, weshalb dort eine Unstetigkeit in U und dessen Ableitung  $\frac{dU}{dR}$  vorliegt. Das führt leicht zu Artefakten. Deshalb ist ein möglicher Ausweg,  $\tilde{u}(r) = u(r) - u(r_c) - \frac{du}{dr}|_{r_c}(r - r_c)$

Damit ist die Simulation wesentlich angenehmer, weil  $\tilde{u}$  stetig und differenzierbar.

Welche Terme innerhalb des Cutoffs liegen, ist  $\mathcal{O}(n^2)$ .

Binning als Lösung (Liste/Baum von Zellen) Nachbarschaftsliste als andere mögliche Lösung für  $r_{ij} < r_n$

z.B.  $r_n = 2.7\sigma$ , also etwas größer als Abschneideradius

Diese Liste ist kürzer als die Nachbarzellen, aber speicherintensiver bei dichten Systemen. Außerdem wartungsintensiver. Annahme dabei: Die Teilchen bewegen sich vergleichsweise langsam, so dass man die Nachbarschaftslisten erst aller  $\approx 20$  Zeitschritte erneuern müssen.

Bei einigen hundert Teilchen ist dieses Verfahren bedeutend effektiver.

⇒computeNeighbourList()

Häufig Multiskalenmodelle

Anwendung: komplexe Flüssigkeiten, Glasübergang, dynamische Gleichgewichte (Nichtgleichgewichte), Bruchbildung

## 8.8 Ergänzungen

### 8.8.1 Heisenberg-Modell

Magnetismus

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \vec{s}_j$$

i, j: Nur nächste Nachbarn

Spin  $s_i$  ist magnetisches Moment. i.A. dreidimensionaler Vektor, auch für d=1,2

Magnetisierung  $\vec{M} = \sum_i \vec{s}_i$

Über das Vorzeichen der Energie H kann man beispielsweise unterscheiden, ob das System ferromagnetisch (alle Spins gleich gerichtet) oder antiferromagnetisch (Spins antiparallel) ist.

Dynamik (d=1)

$$\frac{d\vec{s}_i}{dt} = J\vec{s}_i \times (\vec{s}_{i-1} + \vec{s}_{i+1})$$

Damit lassen sich die Diffusion von Spins betrachten. Auch Muster, die in höheren Dimensionen auftreten, Spinwellen, welche auch im Experiment beobachtet wurden.

Diese und ähnliche Modelle werden im Rahmen der Vorlesung noch öfter betrachtet, da sie auch im Rahmen der Nachbarschaftsbedingungen interessant sind.

### 8.8.2 ergodisches Verhalten

Zeitmittel

$$\overline{f_i(t)} = \frac{1}{t} \int_0^t f(t') dt'$$

Ensemblemittel

$$\langle f(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \overline{f_i(t)}$$

Ergodisch heißt: Alle Teilchen sehen die gleiche Umgebung

Das heißt:  $\overline{f_i(t)} = \overline{f_j(t)}$

Das lässt sich über eine entsprechende Metrik ausrechnen: z.B.

$$\epsilon_i = \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} u(r_{ij})$$

p - Impuls

Damit definieren wir uns eine Energiemetrik  $\Omega_e(t)$ :

$$\Omega_e(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^t (\overline{\epsilon_i(t)} - \langle \epsilon(t) \rangle)^2$$

Wir betrachten, ob  $\Omega_e(t)$  verschwindet.

Zum Beispiel für LJ-Potential: ergodisches System mit  $\Omega_e \sim \frac{1}{t}$

Abschrecken (Quenching) → amorphes System (hier: Glas), nicht ergodisch Das Teilchen sieht nicht mehr die selbe Umgebung, sondern die Umgebung, wie sie beim Abschrecken vorhanden war.

Es gibt auch andere Metriken. Beispiele:

$$\Omega_v(t) = \frac{1}{dN} \sum_{i=1}^N (\overline{v_i(t)} - \langle v(t) \rangle)^2$$

$\langle v(t) \rangle = 0$  (Anfangsbedingung)

$$= \frac{1}{dN} \sum_{i=1}^N \overline{v_i(t)}^2$$

$$\overline{v_i(t)} = \dots = \frac{1}{t} (r_i(t) - r_i(0))$$

⇒

$$\Omega_v(t) = \dots = \frac{\langle R^2(t) \rangle}{dt^2} = \frac{2D}{t}$$

D - Diffusionskonstante

Zum Vergleich: Das hatten wir links auch, wenn wir einen schönen Zufallspfad haben. Hier: Kein Zufallspfad, sondern durch Stöße oder Wechselwirkungen definiert.

im Festkörper:  $R^2$  ist beschränkt. Somit ist  $\Omega_v \sim t^{-2}$ , da die Teilchen lokalisiert sind.

Das gilt sowohl für Kristalle (Anmerkung: ergodisch) als auch für Glas.

Somit eignet sich die Geschwindigkeitsmetrik nicht, ergodische und nicht ergodische Systeme zu unterscheiden.

### 8.8.3 Molekulardynamik für konstante Temperaturen

Bisher: konstante Energie (aka. mikrokanonisches Ensemble, NVE)

Jetzt: konstante Temperatur = konstante kinetische Energie (aka. kanonisches Ensemble, NVT)

- brutal:  $v_i$  skalieren, so dass kinetische Energie konstant bleibt.
- Anderson-Thermostat
  - Wärmebad (groß,  $T = \text{const}$ )
  - Teilchen des Systemes stoßen mit Teilchen des Wärmebades
  - Das Schöne: Es kann selten passieren ( $10^{-4}$ )
  - Es werden keine neuen Teilchen eingefügt, sondern nur einzelne Stöße berechnet.

- Nosé-Hoover-Thermostat  
Zusätzlicher Freiheitsgrad  $\beta$

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = F_i(\vec{r}) - s\vec{p}_i$$

Es wird also ein Reibungsterm proportional zur Geschwindigkeit eingeführt

$$\frac{ds}{dt} = \frac{1}{M} \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} - \frac{dN}{k_B T}$$

M - Masse von s

Somit kann s auch negativ sein, also Teilchen beschleunigen.

Verteilungen werden nicht über das Thermostat aufgeprägt, sondern von den Wechselwirkungen bestimmt.

#### 8.8.4 Molekulardynamik auf der Kugelschale

Fällt aus. Siehe Buch. Coulomb-Potential ist sehr langreichweitig. Führt man Teile der Rechnungen im Fourierraum durch, wird das Ganze schon irgendwie.

Die Kugeloberfläche ist begrenzt und hat keinen Rand, so dass man problemlos über alle (endlich vielen) Teilchen integrieren kann. Trotzdem kann man nicht einfach in kartesischen Koordinaten rechnen.

Es wird zur Simulation von Plasmen eingesetzt. Ladungswolke mit homogen positiv geladenem Hintergrund. Wird in der Astrophysik genutzt. Und Elektronen auf Oberfläche von flüssigem Helium.

Problem: Man kann nicht in kartesischen Koordinaten rechnen, sondern muss das Ganze in Fourierkoordinaten rechnen. Unhandlich.

## 9 Normalschwingungen und Wellen

Normalschwingungen: eher stehende Wellen Wellen (hier): bewegt sich fort

### 9.1 gekoppelte Oszillatoren

Bedingungen:  $d=1$ ,  $N$  Teilchen, Masse  $m$ , Federkonstante  $k$ , Abstand  $a$ , fester Rand  
betrachten: Auslenkung  $u_j(t)$

Fester Rand:  $u_0(t) = u_{N+1}(t) = 0$

Bewegungsgleichungen sind unkompliziert

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_j &= -k(u_j - u_{j+1}) - k(u_j - u_{j-1}) \\ &= -k(2u_j - u_{j+1} - u_{j-1}) \end{aligned}$$

eigentlich longitudinale Schwingungen Darstellung oftmals transversal zur besseren Veranschaulichung

transversal-Schwingungen sind nicht prinzipiell schwieriger Im Experiment gibt es natürlich Unterschiede (euklidischen Abstand berechnen)

ODE sind linear und einfach genug für analytische Lösungen

Ansatz:

$$u_j(t) = \tilde{u}_j \cos(\omega t)$$

(auch sin möglich)

$$-\omega^2 \tilde{u}_j = -\frac{k}{m}(2\tilde{u}_j - u_{j+1} - u_{j-1})$$

Ansatz:

$$\tilde{u}_j = C \sin(qja)$$

(NICHT cos, wegen Rand = 0)

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2k}{m}(1 - \cos(qa)) \\ &= \frac{4k}{m} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) \end{aligned}$$

Welche  $q$ ?

$$u_{N+1}(t) = 0 \Rightarrow q_n = \frac{\pi n}{a(N+1)}$$

$n = 1..N$

$$\tilde{u}_{jn} = C \sin(q_n ja)$$

$q_n$  - Wellenvektor, Wellenzahl

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{q_n}$$

Dispersionsrelation:

$$\omega_n = 2\sqrt{\frac{k}{m}} \sin\left(\frac{q_n a}{2}\right)$$

$\omega_n$  - Normalschwingungen, Eigenmoden (bleiben erhalten, wenn man eine einzige gezielt als AB auswählt)

Hinweis aus mathematischer Sicht:  $\tilde{u}_j n$  sind orthogonal

Sinnvoll:  $\omega_n \leq 2\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega_c$  - Cutofffrequenz

Bei transversalen Schwingungen ergeben sich andere Terme insbesondere der Dispersionsrelation.

allgemeine Lösung:

$$u_j(t) = \sum_{n=1}^N (A_n \cos(\omega_n t) + B_n \sin(\omega_n t)) \sin(q_n j a)$$

Anfangsbedingungen  $\Rightarrow$

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{\frac{(N+1)}{2}}} \sum_{j=1}^N n_j(0) \sin(q_n j a)$$

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{\frac{(N+1)}{2}}} \sum_{j=1}^N \frac{v_j(0)}{\omega_n} \sin(q_n j a)$$

Oscillators OscillatorsMode OscillatorsApp

## 9.2 numerische Lösungen, z.B. für nichtlineare Kräfte

Oscillators

periodische Randbedingungen:  $u_0 = u_N, u_1 = u_{N+1}$

$\rightarrow$

$$q_n = \frac{\pi n}{aN}$$

Restriktion des Kosinus entfällt  $\Rightarrow$  auch

$$\cos(q_n j a)$$

offene Randbedingungen: *freie Ränder*

$$u_0 = u_1$$

$$u_{N+1} = u_n$$

Wir fügen also Teilchen hinzu, die einen konstanten Abstand zum eigentlichen Rand haben.

auch interessant: Änderung der k-Werte (Stufenartig). auch dort gibt es eine Reflektion sowie Phasenverschiebungen.

externe Kraft: periodische Anregung:  $\frac{F_{ext}}{m} = 0.5 \cos(\omega t)$  wirke auf ein Teilchen. Dämpfung:  $-\gamma v_j$

Die Normalmoden bleiben bei externen Kräften erhalten, so dass sich die Energie auf verschiedene Normalmoden verteilen muss.

### 9.3 Fourierreihen

Fouriersynthese: Entwickeln von  $f(t)$ , periodisch in  $t$  mit Periodenlänge  $T$ .

$$f(t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(\omega_k t) + b_k \sin(\omega_k t)$$

$$\omega_k = k\omega_0$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi}{T}$$

$$a_k = \frac{2}{T} \int_0^T f(t) \cos(\omega_k t) dt$$

$$b_k = \frac{2}{T} \int_0^T f(t) \sin(\omega_k t) dt$$

SynthesizeApp

Gibb'sche Oszillationen

im Allgemeinen:

$N$  Datenpunkte  $f(t_j)$  für  $t_j = j\Delta$

$$\Delta = \frac{T}{N}$$

d.h. nur  $\omega \leq \omega_Q = \frac{\pi}{N}$  möglich

$$\gamma_Q = \frac{1}{2\Delta}$$

Nyquist-Frequenz

Theorem Nyquist & Shannon: stetige Funktion ist vollständig bestimmt durch  $N$  Datenpunkte, wenn sie durch einen Filter mit  $\omega_c < \omega_Q$  gelaufen ist.

$1 + \frac{\omega_Q}{\omega_0}$  unabhängige  $a_k$   $\frac{\omega_Q}{\omega_c}$  unabhängige  $b_k$   $\omega_Q: N/2 \Rightarrow N+1$  Koeffizienten wegen

$$\sin(\omega_Q t_j) = 0 \Rightarrow b_{\frac{N}{2}} = 0$$



Damit genau N Koeffizienten und das System ist lösbar.  
 ODE: Analyse

$$a_k = \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_j \cos(\omega_k t_j)$$

$$b_k = \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_j \sin(\omega_k t_j)$$

$$(f_j = f(t_j) = f(j\Delta))$$

komplexe Fouriertransformation

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{i\omega_k t}$$

$$\omega_k = k\omega_0$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi}{T}$$

$$c_{\pm k} = \frac{1}{2}(a_k \pm b_k)$$

$$a_k = a_{-k}$$

$$b_k = -b_{-k}$$

$$c_0 = \frac{1}{2}a_0$$

$$c_k = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) e^{-i\omega_k t} dt \approx \frac{1}{N} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} f_j e^{-i\omega_k j\Delta}$$

inverse Transformation

$$g_k = g(\omega_k) \equiv c_k \frac{T}{\Delta}$$

Operation:  $\ast e^{2\pi k \frac{j}{N}}$  Orthogonalitäten

$$f_j = \frac{1}{N} \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} g_k e^{2\pi k \frac{j}{N}}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} g_k e^{i\omega_k t_j}$$

$\Rightarrow$ Inverse Formel zu  $c_k \Rightarrow$ doppelte Fouriertrafo ergibt die ursprüngliche Funktion. Ein bisschen mit den Normierungen aufpassen, aber im Allgemeinen funktioniert das.

### 9.3.1 FFT

Das selbe wie oben, nur geschickt sortiert. Dabei:

$$W = e^{-i\frac{2\pi}{N}}$$

1. Summe in gerade und ungerade Indizes zerlegen
2. Terme so umformen, dass die Indizes  $j$  beider Teilsummen 0, 1, 2, 3 ... sind
3. Die Terme im Exponenten sind (links)  $2j$  und (rechts)  $(2j+1)$
4. umformen dieser Terme zu  $\frac{j}{N}$ , herausziehen eines  $W^k$  vor der rechten Summe
5. Aufteilen in gerade und ungerade Teile
6. weitere Aufteilung in gerade Teile der geraden Anteile ( $g^{ee}$ ) und so halt
7. hinsehen und merken, dass wir unten recht wenige Exponentialfunktionen haben (selber Vorfaktor  $W$ . Potenzieren kann recht schnell geschehen)

also  $\mathcal{O}(N \log N)$  statt  $\mathcal{O}(N^2)$

OSP stellt auch SimpleFFT zur Verfügung.

### 9.3.2 Wrap-Around-Ordnung

-f .. 0 .. f  $\rightarrow$  0 .. f, -f .. 0

toNaturalOrder  
FFTCalculationApp  
FFTFrame

räumliche Fouriertransformation

$$\Psi(x) \rightarrow \phi(q)$$

$$q_0 = \frac{2\pi}{L}$$

Gauß  $\rightarrow$  Gauß

## 9.4 Fouriertransformation in d=2

$$f(x, y) = \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} c_{nm} e^{iq_n x} e^{iq_m y}$$

$$q_n = 2\pi \frac{n}{X}$$

$$q_m = 2\pi \frac{m}{Y}$$

X, Y - Periodenlängen  
 FFT2DcalculationApp  
 Gauss2D → Gauss2D

## 9.5 Fourier-Integrale für nichtperiodische Funktionen

$$g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

Manchmal werden die Vorfaktoren auch auf beide Integrale verteilt. Auch hier haben die Exponenten umgekehrte Vorzeichen.

Numerisch werden auch hier wieder Stützstellen eingesetzt. Die Zahl der Stützstellen steigt linear mit der Periodenlänge.

## 9.6 Leistungsspektrum

Idee: Ein elektrisches Signal wird hinsichtlich seiner Leistung charakterisiert.

Leistung

$$P = \frac{1}{T} \int_0^T |f(t)|^2 dt$$

MAGIC

$$= \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} |c_k|^2$$

Die Leistung wird hier durch einige wenige Koeffizienten wiedergegeben. Das unterstreicht die Bedeutung der Fourierzerlegung bzw. der Normalschwingungen. Diese Verteilung wird nun durch diese Koeffizienten wiedergegeben. Name: Parseval'sches Theorem (zumindest eine Form davon)

$$\omega > \omega_Q$$

⇒  $\omega + \omega_Q$ -Terme werden zurückgefaltet auf  $\omega - \omega_Q$

Dagegen hilft beispielsweise Filtern des Signales.

### 9.6.1 FPU-Problem

(Fermi, Pasta, Ulam 1955)

$$F_{ij} = -(u_i - u_j) - \alpha(u_i - u_j)^3$$

Fragestellung: ergodisch oder nichtergodisch?

(lineares Problem ist nichtergodisch, da es in seiner Normalschwingung bleibt und somit nicht den gesamten Zustandsraum abdeckt)

Erwartung: Nichtlineare Oszillatoren werden ergodisch, da durch die Nichtlinearität die Leistung einer Normalschwingung auf die andere übertragen werden kann.

Qualitativ: Für bestimmte (sehr kleine)  $\alpha$  ist das System nichtergodisch. Das erste qualitative neue Ergebnis, das sich aus der Numerik ergeben hat.

## 9.7 laufende Wellen

Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Bewegungsgleichung aus Kap. 9.1. für  $N \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ ,  $Na = \text{const}$

$$c^2 = \frac{k}{m} a^2 = \frac{ka}{\frac{m}{a}}$$

c - Schallgeschwindigkeit

Lösung: jede  $f(x \pm ct)$  insbesondere  $u = A \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x \pm ct)\right)$  und  $u = B \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x \pm ct)\right)$

Diskretisierung:

$$u(x, t + \Delta_t) = 2u(x, t) - u(x, t - \Delta_t) + \left(c \frac{\Delta_t}{\Delta_x}\right)^2$$

$$(u(x + \Delta_x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta_x, t))$$

Wenn  $\left(c \frac{\Delta_t}{\Delta_x}\right)^2 \equiv 1$ : Beste numerische Ergebnisse.

z.B.  $u(x, t = 0) = e^{-(x-10)^2}$  Einfach mal betrachten, wo die Gaussfunktion gewesen sein muss, um nun so auszusehen.

allgemeiner Ansatz:  $u(x, t = -\Delta_t) = e^{-(x-10+c\Delta_t)^2} \Rightarrow$  Bewegung nach rechts.

Sich überlagernde Pulse stören sich nicht, jedoch kann es zu numerischem Bullshit führen.

Schwebungen sind ebenso möglich, wenn die Wellen leicht unterschiedliche Geschwindigkeiten haben.

Cain:

### 9.7.1 FFT-Rechenregeln

FT von  $h(t) = H(f)$

Eigenschaften:

$h(a * t)$	$\frac{1}{ a } H\left(\frac{f}{a}\right)$	Zeitskalierung
$H(b * f)$	$\frac{1}{ b } h\left(\frac{t}{b}\right)$	Frequenzskalierung
$h(t - t_0)$	$H(f) e^{2\pi i f t_0}$	Zeitverschiebung
$H(f - f_0)$	$h(t) e^{-2\pi i f_0 t}$	Frequenzverschiebung

Eingeschränkte Variablenbereiche

$h(t)$  reell  $\Rightarrow H(-f) = [H(f)]^*$  (konjugiert komplex)

$h(t)$  imaginär  $\Rightarrow H(-f) = -[H(f)]^*$

$h(t)$  gerade (i.e.  $h(t) = h(-t)$ )  $\Rightarrow H(f)$  gerade

$h(t)$  ungerade (i.e.  $h(t) = -h(-t)$ )  $\Rightarrow H(f)$  ungerade

### nichtlinearer Oszillator

Morse-Potential

$$E_{pot} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (e^{u_{j-1} - u_j} - 1)^2$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (Q_j - 1)^2$$

$$F_j = -\frac{\partial E_{pot}}{\partial u_j} = Q_j(1 - Q_j) - Q_{j+1}(1 - Q_{j+1})$$

## 9.8 Interferenz

sphärische Welle geht von  $\vec{r}_1$  aus

$$E(\vec{r}, t) = \frac{A}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} e^{i(q|\vec{r} - \vec{r}_1| - \omega t)}$$

$$q = 2\pi/\lambda$$

eigentlich:  $\vec{q} \times \vec{r}$  aber: kugelförmig

Superposition

$$E = e^{-i\omega t} \mathcal{E}(\vec{r})$$

$$\mathcal{E}(\vec{r}) = \sum_n e^{iq \frac{|\vec{r} - \vec{r}_n|}{|\vec{r} - \vec{r}_n|}} A_n$$

$\mathcal{E}$  - Phasor (sieht aus wie ein großes  $\epsilon$ )

$\Rightarrow$  Gesamtzustand setzt sich aus den einzelnen Wellen zusammen.

Uns interessiert:

- Energiedichte  $E/V$
- Lichtintensität  $E/A$  (Fläche, nicht Vorfaktor)

Beide  $\propto (ReE)^2$  i.d.R. nur zeitgemittelte Werte Wellenfront: Fläche konstanter Phase

HuygensApp Energiedichte von 1 oder mehreren Punktquellen

Feldvisualisierungen:

- RasterFrame
- Scalar2DFrame

Doppelspalt (Experiment: Young) Zwei Punktquellen simulieren Doppelspalt

Beugung an Einfachspalt: Viele Punktquellen sehr eng zusammen führen nach Huygens-Prinzip.

## 9.9 Fraunhofer-Beugung

Für Fernfeld sinnvoll.

$$E(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} \mathcal{E}(\vec{r})$$

$$\mathcal{E}(\vec{r}) = \mathcal{E}_0 e^{iq\vec{r}_1} (1 + a_1 e^{iq(r_2 - r_1)} + a_2 e^{iq(r_3 - r_1)} + \dots + a_{N-1} e^{iq(r_N - r_1)})$$

(Vektorpfeile gespart)

Gitter  $r_1, r_2, \dots, r_N$  mit Abstand  $d$   $r_2 - r_1 = r_3 - r_2 = \dots = d \sin(\theta)$

$$\mathcal{E}(\vec{r}) = E_0 e^{iqr_1} \left( 1 + \sum_{n=1}^{N-1} a_n e^{in\delta} \right)$$

Das ist die Fouriertransformation des Spaltes.

FraunhoferApp Fraunhofer2DApp

Kreisförmige Öffnung  $\rightarrow$  zweidimensionale Fouriertransformation

Aufpassen: Auf einem groben Rechteckgitter können Artefakte der Simulation entstehen.

## 9.10 Fresnel-Beugung

Für Nahfeld  
ebene Wellen

$$\mathcal{E} = E_0 e^{i\vec{q} \times \vec{r}}$$

⇒ tatsächlicher Wellenvektor  $\vec{q}$

$$|\vec{q}| = 2\pi/\lambda$$

Schirm bei  $z = z_0$

$$\mathcal{E} = E_0 e^{iq_z z_0} = E_0 e^{iz_0 \sqrt{q^2 - q_x^2 - q_y^2}}$$

Öffnung bei  $z=0$

$$E_0(q_x, q_y) = \int \int_{\text{Öffnung}} e^{i(q_x x + q_y y)} dx dy$$

Fouriertransformation der Öffnung

Bei weit entferntem Schirm ( $z_0$  groß) lohnt sich der Fraunhoferansatz eher, da die Oszillation im  $e^{iq_z z_0}$ -Term groß wird.

In der Anwendung nimmt man oftmals Radialkoordinaten (zylindrisches System)

## 10 Elektrodynamik

### 10.1 Statische Ladungen

$$\vec{E}(\vec{r}) = K \sum_{i=1}^N q_i / |\vec{r} - \vec{r}_i|^3 (\vec{r} - \vec{r}_i)$$

$\vec{E}$  - elektrisches Feld  $q_i$  - Ladungen

$$K = 1/4\pi\epsilon_0 \approx 9e9 Nm^2/c^2$$

$\epsilon$  - Dielektrizitätskonstante

Früher (gcs, Gaußsches Einheitensystem):  $K = 1$

Offensichtlich: Superposition

Lorentz-Kraft

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B})$$

$\vec{B}$  - Magnetfeld auch wieder in cgs

Vector2DFrame VectorPlotApp

Feldlinien

- parallel zu elektrischem Feld
- stetig
- glatt, außer an Punktladungen
- Dichte entspricht Stärke des elektrischen Feldes
- kreuzen sich nicht
- laufen vom Positiven ins Negative vice versa

*Die Visualisierung der Felder ist eine gewisse Kunst* FieldLineApp: Folgt nach einem Mausklick dem Feld per ODESolver.

Wichtig, um es als Thread zu starten: implements Runnable  
ElectricFieldApp



## 10.2 Elektrisches Potential

Spannung, Energie

$$V(\vec{r}_2) - V(\vec{r}_1) = - \int_{r_1}^{r_2} \vec{E} d\vec{r}$$

Gauss:  $\oint \vec{E} d\vec{r} = 0$

$$E(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r})$$

wenn  $\vec{E} = \vec{E}(|\vec{r}|) \Rightarrow E(r) = -dV/dr$

Punktladung  $V(r) = q/r$

$V = \text{const} \Rightarrow$  Äquipotentialfläche interessant: wegen Gradientenbeziehung ist Fläche immer senkrecht zu den Feldlinien. Äquipotentiallinien kreuzen sich auch nicht. Sie sind abhängig von den Ladungen und Krümmungen

Scalar2DFrame

Im Leiter:  $\vec{E} = 0 \Rightarrow$  Ladungen werden an die Oberfläche verschoben. An starken Krümmungen liegen die Ladungen dichter an der Oberfläche.

in 2d:  $E \sim \frac{1}{r} \Rightarrow V \sim \log r$

Oberflächenladungen schirmen äußere Ladungen im Allgemeinen ab.

## 10.3 Randwertprobleme

Laplace-Gleichung

$$\nabla^2 V = 0$$

V bekannt auf Rand

Taylor-Entwicklung

$$V(x, y) \approx 1/4 [V(x + \Delta_x, y) + \dots]$$

### 10.3.1 triviale Relaxationsmethode

1. Gitter, Rand,  $V_i^R$  Potential des nächsten Randes zu Platz i
2.  $V_i$  beliebig, "reasonable guess"
3.  $V_i = 1/4 \sum_{j \in \text{Nächstnachbarn}} V_j$

LaplaceApp macht genau das

Kondensator: charakteristische Größe: Kapazität

$$C = Q/\Delta V$$

Q - Ladung auf den Kondensatorplatten (+Q & -Q)

Hier interessieren einzelne Ladungen nicht mehr, da die Oberfläche des Leiters stets äquipotential ist.

Oberflächenladungsdichte:

$$\sigma = E_{\perp}/4\pi$$

Zylinderförmiges Kondensatormodell:

$$C = \frac{1}{2} \log r_i/r_a$$

### 10.3.2 Jacobi-Relaxation

gesamtes Gitter wird gleichzeitig aktualisiert Literatur sagt, dass es schlecht konvergiert.

### 10.3.3 Gauß-Seidel-Relaxation

update sequentiell konvergiert besser

noch besser: Update auf einem Untergitter (Stichwort: Schachbrett) Man aktualisiert jeweils nur die Hälfte der Felder

Hier ist das die geschickteste Variante

### 10.3.4 Überrelaxation

$$V_i^{neu} = w \sum_{n.N.} V_j + (1-w)V_i(alt)$$

w liegt zwischen 1 und 2 (deshalb Überrelaxation)

Es gibt auch andere Beispiele für Fälle, in denen ein übermäßiger Gewichtungsfaktor zu einer schnelleren Konvergenz führt.

### 10.3.5 Mehrgitterverfahren

In einigen Anwendungen ist auch die Überrelaxation zu langsam für große Probleme. Auch Überrelaxation ist zu langsam (nur lokale Interaktionen).

Idee bei Mehrgitterverfahren:

Man definiert sich unterschiedliche Gitter, die durch die Schrittweite  $b^n$  im n-ten Gitter unterschieden werden.

Algorithmen benötigt für:

- Prolongationen ( $n \rightarrow n+1$ ) gröberes Gitter nutzen  
→ Werte aus Nachbarzellen nehmen und mitteln (mit bedeckter Fläche wichten)
- Restriktionen ( $n \rightarrow n-1$ ) feineres Gitter nutzen  
→ Werte aus Nachbarzellen nehmen und interpolieren

Buch: Kapitel 19 → nicht-quadratische Gitter (wenn Schreiber sich recht erinnert)

Wenn wir noch externe Ladungen haben, gilt die Poisson-Gleichung:

$$\nabla^2 V = -4\pi\rho(r)$$

$\rho(r)$  - Ladungsdichte

Das ist nicht der metallische Rand, sondern irgend ein Dielektrikum zwischen den Kondensatorflächen, in dem die Ladungen nicht verschiebbar sind. Diese Ladung wird also durch das materialwissenschaftliche Problem vorgegeben.

Taylor (hier für 2d):

$$V(x, y) = \frac{1}{4} \sum_{n.N.} V(x + \Delta_x, y) + \dots + \frac{1}{4} \Delta_x \Delta_y 4\pi\rho$$

$$q = \Delta_x \Delta_y \rho$$

Dielektrika

$$\vec{D} = k\vec{E}$$

k - Dielektrische Suszeptibilität

$$0 = \oint_l k \nabla V dl$$

Näherung:

$$dl \rightarrow 2h \Rightarrow V_i = \frac{\sum_{n.N.} k_j V_j}{\sum_{n.N.} k_j}$$

Somit gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten:

- Systembeschreibung über Ladungsverteilung im Raum
- Beschreibung durch Verteilung der Suszeptibilität im Raum

## 10.4 Lösung von $\nabla^2 = 0$ mit Zufallspfad

$$V_i = \langle V \rangle_{\text{Kreis um } i}$$

$$V(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N V_{Rand}(n)$$

über N Zufallspfade

Man geht also per Random Walk vom Punkt (x,y) aus.

Die Gewichtung stimmt tatsächlich mit der notwendigen Gewichtung überein.

Somit können wir auf einfache Weise mit beliebiger Genauigkeit unser Problem lösen. Dafür ist der Random Walk langsam, wenn wir es mit der Relaxationsmethode vergleichen. Effizient, wenn nur wenige i bzw. (x,y) interessieren.

Besonders gut, wenn viele verschiedene  $V_{Rand}$  betrachtet werden sollen bei fester Geometrie.

$$V(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{x_R, y_R} G(x, y, x_R, y_R) V(x_R, y_R)$$

G - Greensfunktion (Anzahl der Zufallspfade von  $(x, y)$  nach  $(x_R, y_R)$  V - vorgegeben für alle  $(x_R, y_R)$

Poisson-Gleichung

$$V(x, y) = \frac{1}{N} \sum_n V_{Rand}(n) + \frac{1}{N} \pi \Delta_x \Delta_y \sum_{n,i} \rho(x_i, y_i)$$

i - zählt Plätze des n-ten Zufallspfades ab

## 10.5 Bewegte Ladungen

→Strahlung

$$V(\vec{R}) = \frac{q}{|\vec{R} - \vec{r}|}$$

$$\vec{E}(\vec{R}) = -\nabla V(\vec{R})$$

$$q = q(\vec{r})$$

$|\vec{R} - \vec{r}|$  - Ort des Beobachters

⇒verzögerte Wirkung der Bewegung

$$V(\vec{R}) = \frac{q}{r_{ret}}$$

$$r_{ret} = |\vec{R} - \vec{r}(t_{ret})|$$

$r_{ret}$  - verzögerter abstand

$$t_{ret} = t - \frac{r_{ret}(t_{ret})}{c}$$

$$V(\vec{R}, t) = \frac{q}{r_{ret} \left(1 - \frac{\hat{r}_{ret} \cdot \vec{v}_{ret}}{c}\right)}$$

$$\vec{v}_{ret} = \frac{d\vec{r}}{dt} \Big|_{t=t_{ret}}$$

And now to something completely different.

magnetische Felder

$$\vec{B} = \frac{1}{c} \frac{q \vec{v} \times \vec{r}}{r^3}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

$$z.B. \nabla^2 \vec{A} = \mu \vec{j}$$

$\vec{j}$  - Stromdichte

$$\vec{j} = (0, 0, j(x,y)) \quad \vec{A} = (0, 0, A(x,y))$$

$\Rightarrow$  Problem in 2 Dimensionen  $\Rightarrow$  Relaxationsmethode

$$\vec{E} = -\nabla V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

Anmerkung: Ableitung nach R, t aber für  $t_{ret}(\vec{R}, \vec{r}, t)$

$$\vec{E} = q \frac{r_{ret}}{(\vec{r}_{ret} \cdot \vec{u}_{ret})^3} [\vec{u}_{ret}(c^2 - v_{ret}^2) + \vec{r}_{ret} \times (\vec{u}_{ret} \times \vec{a}_{ret})]$$

$$\vec{u}_{ret} = c\hat{\vec{r}}_{ret} - \vec{v}_{ret}$$

$$\vec{a}_{ret} = \left. \frac{d\vec{v}}{dt} \right|_{t=t_{ret}}$$

$$\vec{B} = \vec{r}_{ret} \times \vec{E}$$

$$\vec{A}(\vec{R}, t) = \frac{q \frac{\vec{v}_{ret}}{c}}{r_{ret}(1 - \frac{\vec{r}_{ret} \cdot \vec{v}_{ret}}{c})}$$

Die Formeln sind im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie richtig. Die Formeln sind wegen der retardierten Zeit im Allgemeinen nicht analytisch lösbar.

z.B.

$$x(t_{ret}) = A \cos(\omega t_{ret})$$

(**Achtung:** Im Buch steht hier  $\cos^2()$ . Diese Formel hier ist richtig.) Suche Lösung zu

$$t_{ret} = t - \frac{r_{ret}}{c} = t - \frac{1}{c} \sqrt{(x - A \cos(\omega t_{ret}))^2 + y^2 + z^2} \text{ für } \vec{R} = (x, y, z)$$

$\Rightarrow$  Nullstellensuche für  $f(t_{ret}) = t - t_{ret} - \frac{r_{ret}}{c}$  Besonders, weil Bisektion für Pfad, nicht für Zeit.

V, A: Liénard-Wiechert-Potential

Radiating Charge berechnet  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$  aus LWP für obiges Beispiel

z.B.  $x_{ret} = 1 - 2t_{ret}$

## 10.6 Maxwell-Gleichungen

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \nabla \times \vec{E} (1)$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \nabla \times \vec{B} - 4\pi j (2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j} (3)$$

$\Rightarrow$  Ladungserhaltung

mit  $\nabla \cdot$  und  $\nabla \cdot (\nabla \times \vec{a}) = 0$  und  $\int dt \Rightarrow$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \text{ und } \nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$\nabla \times$  numerisch? z.B.

$$(\nabla \times \vec{B}) \cdot \vec{\hat{S}} = \lim_{s \rightarrow 0} 1/s \oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l}$$

Fläche  $\vec{S}$  Rand C

$$\approx 1/\Delta_l^2 \sum_{n=1}^4 B_n \Delta l_n$$

$\nabla \cdot$  numerisch? z.B.

$$\nabla \cdot \vec{j} = \lim_{V \rightarrow 0} 1/V \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{S}$$

$$\approx 1/\Delta_l \sum_{n=1}^6 j_n$$

(Kurze Wiederholung)

Maxwell-Gleichung auf Gitter (Algorithmus):

*Gitter aus Würfeln*

1.  $\rho$  im Mittelpunkt des Würfels
2. mit (3):  $j$  auf Flächenmitten berechnen
3. mit (2):  $E$  auf Flächenmitten und damit auch  $\nabla \times \vec{B}$  auf Flächenmitten
4. mit (1):  $B$  auf Ecken

Dieser Algorithmus wurde 1966 von Yee (Elektroingenieur) entwickelt 1988 von Fischer (Physiker) neu entdeckt

Zeiten:

1. zu  $t - \Delta_t/2$
2. zu  $t$
3. zu  $t + \Delta_t/2$
4. zu  $t + \Delta_t$

Mit dieser Aufteilung (Gitter und Zeiten) sind alle Integralgleichungen auch diskret erfüllt.

MaxwellApp

current: Strom in Zeiteinheit  $\Delta_t$  als elektrostatischer Dipol

$q < 0$  am Startpunkt

$q > 0$  am Zielpunkt

Problem:

- Anfangsbedingungen
- Randbedingungen: einfache Lösung: feste Ränder, aber dann Reflektionen

immer noch ein Problem, deshalb: damping

stabil, wenn  $c \Delta_t \leq \Delta_l / \sqrt{3}$

# 11 Integration

## 11.1 klassische Methoden in 1 Dimension

$$F = \int_a^b f(x) dx$$

$$\Delta_x = \frac{b-a}{n}$$

$$x_i = x_0 + i\Delta_x$$

$$x_0 = a$$

$$x_n = b$$

$$f_i = f(x_i)$$

### 11.1.1 Rechtecknäherung

Es werden rechteckige Bereiche entlang der Kurve aufsummiert

Oberkante:

$$F_n = \sum_{i=0}^{n-1} f_i \Delta_x$$

oder Unterkante:

$$F_n = \sum_{i=0}^{n-1} f_{i+\frac{1}{2}} \Delta_x$$

Fehler:  $\mathcal{O}(1/n)$

Der Fehler selbst wird also um einen festen Faktor verringert, bleibt aber in selber Größenordnung.

### 11.1.2 Trapeznäherung

$$F_n^{(T)} = \left(\frac{1}{2}f_0 + \sum_{i=1}^{n-1} f_i + \frac{1}{2}f_n\right)\Delta_x + \mathcal{O}(1/n^2)$$

Man folgt der Kurve also mit Trapezen und summiert deren Fläche auf.

Trick zur Einsparung der Hälfte der Rechenzeit:

$$F_{2n}^{(T)} = \frac{1}{2}F_n + \left(\sum_{i=1}^n f_{2i-1}\right)\Delta_x$$



**11.1.3 parabolische Näherung**

$$F_2 = \frac{1}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)\Delta_x$$

Parabel von  $x_0$  nach  $x_2$  durch  $x_1$   
Simpson-Regel

$$F_n = \frac{1}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)\Delta_x$$

Trick zur Beschleunigung:

$$F_{2n}^{(S)} = (4F_{2n}^{(T)} - F_n^{(T)})/3$$

NumericalIntegrationApp  
RectangularApproximation  
IntegralCalcApp  
FunctionDrawer

relativer Fehler < Toleranz

$$|F_{2n} - F_n| < \epsilon$$

Annahme, dass  $F_n \rightarrow F$   
Extrapolation z.B. für Trapez:

$$F = F_n + C/n^2$$

Romberg-Integration  $\rightarrow$  Integral (Java-Klasse)  
dF/dx = f  
ODE mit  $F(a) = 0$   
z.B. mit Runge-Kutta  
z.B.

$$\delta(x) = 1/\pi \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon_{x^2 - \epsilon^2}$$

$\int = 1$  (scheinbar erstmal nur für RK oder so)

**11.1.4 Einschub (Anhang D im Buch): Polynome und deren Benutzung zur Integration**

Horner 1819

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + x(a_3 + \dots)))$$

PolynomialApp

add a

add p

subtract a

subtract p

derivative

integral

roots (Nullstellen)

deflate (eine Nullstelle entfernen) (Teile Polynom durch  $(x - x_0)$ )

z.B. Taylorreihe

orthogonale Polynome

z.B. Chebyshev/Tschebyschow

$T_0 = 1$

$T_1 = x$

$T_n = 2xT_{n-1} - T_{n-2}$

auf  $[-1, 1]$

$$T_n(\cos(\theta)) = \cos(n\theta)$$

Interpolation: Lagrange-Polynome

$$p(x) = \sum_{i=0}^n \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j) f_i}$$

$$p(x_i) = f_i$$

LagrangeInterpolatorApp

besser: kubische Splines stückweise Interpolation mit stetiger 2. Ableitung n=3 CubicSplineApp

### 11.1.5 Fitting

PolynomialFitApp PolynomialLeastSquares

Funktion invertieren: aus  $f_i = f(x_i)$  suchen wir  $x = f^{-1}(y)$  bestimmen kubische Splines für  $x_i = f^{-1}(f_i)$

## 11.2 Monte-Carlo-Integration

MonteCarloEstimatorApp

Hit-or-Miss

h - Höhe des Hüllrechtecks

$(x_i, y_i)$  zufällig wählen und prüfen, ob es innerhalb des gewünschten Integrationsbereiches liegt. Zählen, wie oft innerhalb oder außerhalb (hit/miss)

Integral  $F = R \cdot \text{hit} / (\text{hit} + \text{miss})$  R - Rechteckfläche

besser: Berechnung des Mittelwertes

$$\begin{aligned} F_n &= (b-a)/n \sum_{i=1}^n f(x_i) \\ &= (b-a) < f > \end{aligned}$$

jetzt:  $x_i$  gewürfelt

## 11.3 Höherdimensionale Integrale

d = 2

$F = \int_A f(x, y) dx dy$  über Fläche  $A \subset$

$$\approx \sum_{i=0}^{n_i-1} \sum_{j=0}^{n_j-1} f_{ij} \Delta x \Delta y H(x_i, y_i)$$

H - Heaviside-Funktion = 1, wenn  $(x_i, y_i) \in A$  = 0 sonst

$n = n_x n_y (n_z)$  Stützstellen

Fehler

$\mathcal{O}(1/n^{1/d})$  für Rechteck-Methode

$\mathcal{O}(1/n^{2/d})$  für Trapez-Methode

$\mathcal{O}(1/n^{4/d})$  für Simpson-Methode

### Monte-Carlo

$$F_n = R/n \sum_{i=1}^n f(x_i, y_i) H(x_i, y_i) + \mathcal{O}\left(1/n^{\frac{1}{2}}\right)$$

$$(x_i, y_i) \in R$$

$\Rightarrow$  Fehler ist unabhängig von der Dimension.

## 11.4 Fehleranalyse für Monte-Carlo-Verfahren

Varianz

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}^2 &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n |f(x_i) - <f>|^2 \\ &\approx \sigma^2 = <f^2> - <f>^2 \end{aligned}$$

Fehler des Mittelwertes

$$\sigma_M = \sigma / \sqrt{n-1} \approx \sigma / \sqrt{n}$$

d.h.  $|F_n - F| \leq \sigma_M$  mit 68% Wahrscheinlichkeit  $\leq 2\sigma_M$  mit 97% Wahrscheinlichkeit  
wenn Messungen Gaußverteilt sind und unabhängig von einander sind.

Offensichtliches Problem, wenn Messungen korreliert sind.

Lösung: Abstand zwischen Messungen i und j vergrößern.

Ergebnisse zusammen fassen:

$$f_I^{(m)} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f_{i+m(I-1)}$$

$\sigma_{n/m} / \sqrt{n/m}$  muss unabhängig von m werden.

Dann ist die Größe der Blöcke m groß genug gewählt.

Normaler Weise wählt man m empirisch.

Wenn Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht bekannt ist (nicht Gauß folgt): Fehlerabschätzung Bootstrapping

n Datenpunkte  $(x_i, y_i) \Rightarrow N$  mal n Datenpunkte zufällig auswählen (einige kommen mehrfach vor, andere gar nicht)

$$\sigma_G^2 = 1/N - 1 \sum_{j=1}^N |G_j - \langle G \rangle|^2$$

für beliebige Messgröße G

## 11.5 Wahrscheinlichkeitsverteilungen

$r_i$  gleichverteilt in  $[0, 1)$

### 11.5.1 Importance Sampling

mehr Stützstellen in wichtigen Bereichen

wähle r:

$$\sum_{j=0}^{i-1} p_j \leq r < \sum_{j=0}^i p_j$$

$\Rightarrow$ finde i

kontinuierlich:

$p_j \rightarrow p(x)dx$  mit  $p(x)$  als Wahrscheinlichkeitsdichte

kumulative Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(x')dx' \equiv r$$

$\Rightarrow$ inverse Transformation, um Zufallszahlen mit  $p(x)$  verteilt

Rezept:

1. zufälliges r wählen

2. löse  $P(x) = r$  nach x auf  $\Rightarrow x$

Gleichverteilte Zufallszahlen auf  $[a, b)$

$$p(x) \rightarrow P(x) = \frac{x-a}{b-a} \equiv r \Rightarrow x = a + (b-a)r$$

Exponentialverteilung:

$$p(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$$

$$x \geq 0$$

$$P(x) = 1 - e^{-x/\lambda} \equiv r$$

$$x = -\lambda \log(1-r)$$

$$\{r\} = \{1-r\}$$

$$x = -\lambda \log r$$

Gauß: P ist nicht analytisch

Trick: d=2:

$$p(x, y) dx dy = \frac{1}{2} \pi e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} dx dy$$

mit  $\tan(\theta) = y/x$  und  $\rho = a^2/2$

$$dx dy = r dr d\theta$$

$$d\rho/dr = r$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$r$  - Radius, keine Zufallszahl

$$P(\rho, \theta) d\rho d\theta = \frac{1}{2\pi} e^{-\rho} d\rho d\theta$$

$\Rightarrow$

$$x = \sqrt{2\rho} \cos(\theta)$$

$$y = \sqrt{2\rho} \sin(\theta)$$

Box-Muller (beide gleichverteilt)

### 11.5.2 Akzeptanz-Ablehnung

Rechteck

wähle  $r \rightarrow x \in [a, b)$

wähle  $r' \rightarrow y \in [0, h)$

$y \leq p(x) \Rightarrow x$  akzeptiert

sonst: nächstes  $x$

Verallgemeinerung

$$\begin{aligned}
 h &\rightarrow w(x) \\
 w(x) &> p(x) \forall x \in [a, b) \\
 \int_a^b w(x) dx &= A \\
 y &\in [0, w(x))
 \end{aligned}$$

Methode bleibt die Selbe  
 Das Ganze ist effizient, wenn  $w(x) - f(x)$  klein  
 Rejection Method Erläuterung. Siehe Computerphysik.

## 11.6 Importance Sampling

(Dieser komplette Abschnitt macht für mich keinen Sinn)

$$F = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} dx$$

mit bekanntem  $p(x)$  (normierte Dichte)

$$F_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{p(x_i)} p(x_i)$$

$x_i$  mit  $p(x)$  gewählt  $\Rightarrow$

$$F_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{p(x_i)}$$

Ziel:  $\sigma$  kleiner

## 11.7 Metropolis-Algorithmus

statische Mechanik

Boltzmann-Verteilung  $p(E) = e^{-E/k_B T}$

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(x) p(x) dx}{\int p(x) dx}$$

Idee: Zufallspfad so, dass  $x_i$  mit  $p(x)$  verteilt.

Übergangswahrscheinlichkeit  $T_{ij} = T(x_i \rightarrow x_j)$

Hinreichend: detailed balance

$$p(x_i) T_{ij} = p(x_j) T_{ji}$$

Die Formeln sind nicht eindeutig. Andere Formulierungen sind oftmals auch richtig.

Beispiel:

$$T_{ij} = \min \left( 1, \frac{p(x_j)}{p(x_i)} \right)$$

In d=1 wähle  $\delta_i \in [-\delta, \delta]$

Test  $x_t = x_i + \delta_i$

$$w = p(x_t)/p(x_i)$$

Entscheidung über  $x_t$ :  $w \geq 1$ : akzeptiert  $x_{i+1} = x_t$

$w < 1$ : Zufallszahl  $r$

$r \leq w$ : akzeptiert  $x_{i+1} = x_t$

$r > w$ : abgelehnt  $x_{i+1} = x_i$

Man erreicht eine Absenkung der Energie, da das System Richtung niedriger Energie tendiert. Um über Barrieren zu kommen, erreicht man auch höhere Energien durch den Random Walk.

Man beginnt üblicher Weise in der Nähe des Maximums, wenn man das Maximum halbwegs kennt.

Problem:  $\sigma_M$  unrealistisch, weil  $x_i$  stark korreliert sind.

in Kap. 7: Korrelationsfunktion

$$C(j) = \frac{\langle x_{i+j}x_i \rangle - \langle x_i \rangle^2}{\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} \sim e^{-t/\tau}$$

$t$  - Abstand zwischen den Messungen von  $x_i$  und  $x_{i+j}$ . Häufig  $\sim j$

Abstand  $2\tau$  oder  $3\tau$  zwischen Messungen. oder Ergebnisse zusammen fassen.  $\Rightarrow$  Kap.

11.3

Schluss für dieses Semester

## 12 Perkolation

Plätzchenallegorie: Plätzchen auf dem Backblech kommen zu nah und kleben zusammen  
→Phasenübergang.

Phasenübergang vorhanden, wenn ein zusammenhängender Pfad in eine Dimension vorhanden ist. Beispiel: Leitender Pfad.

Bezeichnungen: Perkulations-Phasenübergang, Konnektivität, Swiss Cheese-Modell

In der Regel mehrdimensionale Gitter →Platzperkolation, Sitepercolation, Knotenperkolation

### 12.0.1 Modell: Platzperkolation

Quadratgitter, Wahrscheinlichkeit  $p$  für jeden Knoten

Mit steigender Wahrscheinlichkeit existieren zunehmend perkolierende Cluster. Durch Entfernung einzelner Knoten können Pfade im Phasenübergang ausgelöscht werden. Mit höherer Wahrscheinlichkeit (0.8) verändern kleinere Fluktuationen die Zahl der Pfade nicht mehr signifikant.

Interessante Fragestellungen: Konnektivität, Kompaktheit, Verästelung

Algorithmus: Für jede Zelle: Ziehe Zufallszahl  $(0, 1]$   $r \leq p$ : Platz wird besetzt

Suche Phasenübergang für  $p_c$

$p_c$  - kritische Perkolation, Perkolationsschwelle

perkolierender Cluster, unendlicher Cluster

### 12.0.2 Alternatives Modell: Kantenperkolation, Bindungsperkolation, bond percolation

Statt der Plätze werden die Kanten untersucht, sonst äquivalent

Auch hier Phasenübergang, aber  $\overline{p_c} \neq p_c$  (der Querstrich ist Schreibers eigene Notation)

Anschaulich: Aus einem Maschendraht werden Drähte getrennt. Phasenübergang entspricht dann einer Trennung des Gitters in unabhängige Teile.

Watson & Leath 1947: "Connectivity of Chicken Wire"

Anwendungen: Ölförderung (poröse Felsschichten) Polymere Bauteile granulare Materie

Flory 1941: Polymeruntersuchungen Broadbent & Hammersley 1974: erstmalig Perkolation auf Gitter untersucht

## 12.1 Perkolationsschwelle $p_c$

PercolationApp LatticeFrame



$$p_c \approx 0.59$$

Kleine Gitter: Finite-Size-Effekte

Einige Perkulationswahrscheinlichkeiten lassen sich manuell bestimmen.

Variationen existieren für offene und geschlossene Randbedingungen.

Bestimmung des Phasenüberganges durch Ensemblemittel (zwangsläufig): ~50% der Realisierungen haben unendlichen Cluster?  $\Rightarrow$  Phasenübergang

10 bis 20 Gitter reichen in der Regel

$$p_c = 0.59274621(13)$$

Rechenaufwand der Auswertung steigt polynomiell (mindestens kubisch) mit Breite des quadratischen Gitters.

Dreiecksgitter: Perkulationsgrenze sinkt, da Zahl der Nächstnachbarn sinkt.

$$p_c = 0.5 \text{ (Wert ist exakt)}$$

### 12.1.1 Duales Gitter

Kantengitter lässt sich inverses versetztes Kantengitter überführen

Größen: offene Randbedingungen:  $n \rightarrow n-1$  periodische Randbedingungen:  $n \rightarrow n$

Besetzungswahrscheinlichkeiten:  $p(\text{dual}) = 1 - p(\text{orig})$

$$\Rightarrow \overline{p_c(\text{orig})} = 0.5 = \overline{p_c(\text{dual})}$$

Dreiecksgitter, Platz-Perkolation:  $p_c = 0.5$

Quadratgitter ist nicht eindeutig überführbar

### 12.1.2 Kontinuums-Modell

Einheitsscheiben im Kasten  $L^2$

$$\text{Bedeckung } \phi = 1 - e^{-\rho\pi R^2}$$

$\rho$ : Dichte der Scheiben

$\phi_c$  - kritische Bedeckung

$\phi_c = p_c/4$  (für Quadratgitter)

Es ist unüblich, hierbei vom Gitter auszugehen

Mögliche Unterscheidung: Dürfen sich Scheiben überlagern?

Untersuchung des Käses (statt der Löcher wie bisher):

$$\psi_c = 1 - \phi_c$$

## 12.2 Quantitative Analyse

### 12.2.1 $P_\infty$

$$P_\infty(p) = \frac{\text{Anzahl der Plätze im Perkulationscluster}}{\text{Anzahl überhaupt besetzter Plätze}}$$

$p < p_c : P_\infty = 0$ , da es keinen unendlichen Cluster gibt

$P_\infty$  wächst monoton bis  $p=1 \Rightarrow P_\infty = 1$

### 12.2.2 $n_s$

$$n_s(p) = \frac{\text{Anzahl der Cluster der Größe } s}{\text{Anzahl der Plätze}}$$

Berechnung schließt unendliche Cluster aus

$s$  - Anzahl der Plätze im Cluster

Eigentlich ist die räumliche Ausdehnung sinnvoller, aber  $n_s$  ist historisch gewachsen.

### 12.2.3 $w_s$

$w_s$  - Wahrscheinlichkeit, dass ein Platz zu einem Cluster bestimmter Größe  $s$  gehört

$$w_s = \frac{sn_s}{\sum_s sn_s}$$

$\sum_s sn_s(p) = p$  nur für  $p < p_c$ , da sonst der unendliche Cluster ausgeschlossen werden muss.

### 12.2.4 mittlere Clustergröße $S$

$$S(p) = \sum_s sw_s = \frac{\sum_s s^2 n_s}{\sum_s sn_s}$$

$S(p)$  = mittlere Clustergröße

Auch hier unendlicher Cluster ausgeschlossen :-)

$$\text{Gyrationsradius}^2 : R_s^2 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s (r_i - \bar{r})^2$$

innerhalb des Quadrates in der Summe: Abstand vom Schwerpunkt

$$\bar{r} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s r_i$$

$R_s$  ist zunächst auch Größe des einzelnen Clusters.

Vorteil: aussagekräftiger Nachteil:  $R_s$  ist rational

### 12.2.5 Konnektivitätslänge $\xi^2$

$$\xi^2 = \frac{\sum_s (s-1)w_s < R_s^2 >}{\sum_s (s-1)w_s}$$

in der Regel:

$$\approx \frac{\sum_s s^2 n_s < R_s^2 >}{\sum_s s^2 n_s}$$

Und schon wieder wird der unendliche Cluster ausgegrenzt.

## 12.3 Newman-Ziff-Algorithmus

Vergleichsweise effizienter Algorithmus zur Auffindung von Clustern

n - Anzahl besetzter Plätze steigt von 0 bis  $L^2 \Rightarrow p$  steigt von  $0/L^2$  bis  $L^2/L^2$  (0 bis 1)

Sinnvoll: Im Vorfeld eine Reihenfolge der Besetzung auswürfeln und anschließend die ersten n Plätze besetzen.

neuer Platz: neuer Cluster oder Teil eines alten Clusters oder Teil mehrerer alten Cluster

Die alten Cluster werden dann zu einem zusammen gefasst.

Entspricht effizienten Algorithmen zur Prüfung der Graphenkonnektivität.

## 12.4 Kritische Exponenten

Ein geometrischer Phasenübergang liegt im Gegensatz zum temperaturgetriebenen thermodynamischen Phasenübergang vor.

$p \neq p_c$ :  $n_s(s)$  fällt schnell ab

$p \approx p_c$ :  $n_s(s)$  fällt langsam ab

$\Rightarrow$  Cluster aller Größen, d.h. aller Längenskalen

$\Rightarrow$  typische Beobachtung bei Phasenübergängen

$\xi$  divergiert bei  $p_c$

Annahme: Das entspricht einem Potenzgesetz mit kritischem Exponenten  $\nu$

Erfahrung zeigt: Phasenübergänge werden üblicherweise durch Potenzgesetze dargestellt

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu}$$

Es gibt ein  $\nu$ , allerdings sind zwei  $\nu$  (für kleine und große p) denkbar. In den meisten Fällen ist das System allerdings in p symmetrisch.

Beispiele:

$$d=2 : \nu = 4/3$$

$$d=3 : \nu = 0.88..$$

$$P_{\infty}(p) \sim (p - p_c)^{\beta}$$

$\Rightarrow$  ein stetiger Phasenübergang liegt vor (weil stetige Funktion)

$$d=2 : \beta = 5/36$$

$$d=3 : \beta = 0.41..$$

$\beta$  wird gelegentlich auch als Ordnungsparameter bezeichnet, in Übereinstimmung mit Phasenübergängen, in denen eine Ordnung in der höheren Phase auftritt.

$$S(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma}$$

$$d=2 : \gamma = 43/18$$

$$d=3 : \gamma = 1.80..$$

$$n_s(p = p_c) \sim s^{-\tau}$$

$$d=2 : \tau = 187/91$$

$$d=3 : \tau = 2.19..$$

Problem: bei  $p \approx p_c$ :  $\xi \approx L$  : finite size-Effekte

Qualitativ "falsches" Verhalten, wenn:

$$L \approx \xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$$

$\Rightarrow$  finite size-Effekte treten auf

$$|p - p_c| \sim L^{-1/\nu}$$

Für  $L \approx \xi$ :

$$P_{\infty}(p = p_c) \sim L^{-\beta/\nu}$$

$$S(p = p_c) \sim L^{\gamma/\nu}$$

Größe  $M :=$  Anzahl der Teilchen ("Masse")

$$M(p = p_c) \sim L^D$$

Merke: Doppelt logarithmische Darstellung.

$D$  - fraktale Dimension, Massendimension

### 12.4.1 Skalengesetze

$$2\beta + \gamma = \nu d$$

$d$  - Dimension

### 12.4.2 Universalität

Exponenten sind invariant gegenüber weiterer Modelleigenschaften. Dimension reicht.

$\Leftrightarrow$  Kritische Exponenten sind universell innerhalb ihrer Dimension

$\Rightarrow$  selbe Universalitätsklasse

## 12.5 Renormierungsgruppe

Kenneth Wilson

Idee: Plätze werden zusammengefasst zu einem Superplatz bzw. Superzelle.

Blocklänge  $b$ , d.h.  $L \rightarrow L/b$

Skalierung aller Längen um  $1/b$ , z.B.  $\xi \rightarrow \xi/b$

nötig: Abbildungsvorschrift für leere/besetzte Plätze

Lässt sich rekursiv ausführen  $\Rightarrow p_0, p_1, \dots, p_i \dots$

Mit steigendem  $i$  steigt im Allgemeinen, wenn  $p > p_c$  und sinkt, wenn  $p < p_c$ .

$p_0 \approx 0$ : besetzte Plätze  $\rightarrow$  leerer Superplatz  $\Rightarrow p_r \rightarrow 0$

$p_0 \approx 1$ : leere Plätze  $\rightarrow$  besetzter Superplatz  $\Rightarrow p_r \rightarrow 1$

$\Rightarrow$  triviale Fixpunkte des Renormierungsgruppenflusses ( $p_i(i)$ )

$p_0 = p_c \rightarrow$  Cluster aller Größen

$\Rightarrow p_r = p_c \Rightarrow$  nichttrivialer Fixpunkt

RGApp

### 12.5.1 Renormierungsgruppentransformation

$p' = R(p)$  rekursiv

Näherung: Zellen werden unabhängig behandelt.

Somit gehen Verbindungen verloren bzw. neue entstehen.

Beispiel:

$$R(p) = p^4 + 4p^3(1-p)^3 + 2p^2(1-p)^2$$

(Betrachtung der Besetzungswahrscheinlichkeiten der Felder einer Besetzungsvorschrift)

z.B.  $p_0 = 0.5$

$R(0.5) = 0.44$  (0.44)

$R(0.44) = 0.35$  (0.31)

$\rightarrow 0$

$p_0 = 0.7$

$p_1 = 0.83$

$\rightarrow 1$

$p_c \Rightarrow$  läuft gegen 0

Wo liegt der Fixpunkt von  $R$ ?

$$R(p^*) = R(p^*)$$

$$p^* = 0$$

$$p^* = 1$$

$$p^* = 0.61804..$$

Abweichung wird unter Berücksichtigung der Näherung als sehr gering angesehen

$$\xi' = \xi/b$$

$$\xi = A|p - p_c|^{-\nu}$$

$$A|p' - p^*|^{-\nu} = A|p - p^*|^{-\nu}/b(*)$$

Taylor um  $p^*$ :

$$p' = R(p) = R(p^*) + (p - p^*)\lambda + \dots$$

$$\lambda = dR/dp|_{p=p^*}$$

$$p' - p^* = R(p) - R(p^*) \approx \lambda(p - p^*)$$

(\*)  $\Rightarrow$

$$b = \lambda^\nu$$

$\Rightarrow$

$$R(p) = -p^4 + 2p^2$$

$$\lambda = -4p(1 - p^2)|_{p^*} \approx 1.528..$$

$$\nu = \log b / \log \lambda = \log 2 / \log \lambda \approx 1.635..$$

Erneut eine gute Übereinstimmung.

Wiederholung:

(Transformation mit vertikalen Verbindungen  $\rightarrow 7$  Möglichkeiten)

$R(p) = \dots = p \Rightarrow \text{Fixpunkt}$

$$R(p) = -p^4 + 2p^2$$

$$R(p^*) = p^* \approx 0.618$$

$$\lambda = dR/dp|_{p=p^*} \approx 1.528$$

$$\nu = \log 2 / \log \lambda \approx 1.635$$

### 12.5.2 vertikale oder horizontale Verbindungen

( $\rightarrow$ +2 Möglichkeiten = 9)

$$R(p) = p^4 - 4p^3 + 4p^2$$

$$p^* = 0, p^* = 1, p^* = 3 \pm \sqrt{5}/2 \approx 0.382$$

$$\lambda = 4p^3 - 12p^2 + 8p|_{p^*} \approx 1.528$$

$\Rightarrow$ entspricht  $\lambda$  bei vertikalen Verbindungen

$\Rightarrow \nu$  stimmt überein

### 12.5.3 vertikalen und horizontale Verbindungen

$$R(p) = -3p^4 + 4p^3$$

$$p^* = 0, p^* = 0, p^* = 1 \pm \sqrt{13}/6 \approx 0.758$$

$$\lambda = -12p^3 + 12p^2|_{p^*} \approx 1.642$$

$\Rightarrow$ stimmt gut mit den beiden 1.528 überein

### 12.5.4 $b=3$

$$q = 1 - p$$

$$R(p) = p^9 + 9p^8q + 36p^7q^2 + 67p^6q^3 + 59p^5q^4 + 22p^4q^5 + 3p^3q^6$$

### 12.5.5 $b = \sqrt{3}$

Dreieck

Trafo: mindestens zwei besetzte Plätze

$$R(p) = p^3 + 3p^2(1 - p)$$

$$p^* = 0, p^* = 1, p^* = \frac{1}{2}$$

$$\lambda = 6p(1 - p)|_{p^*} = 3/2$$

$$\nu = \frac{\log \sqrt{3}}{\log \frac{3}{2}} \approx 1.3546$$

$p_c \approx p^*$  offensichtlich nicht notwendig

Alternativen:

$$p_c \approx \int_0^1 p \frac{dR}{dp} dp$$

oder

$$p_c \approx p_{max}$$

d.h.

$$\left. \frac{d^2 R}{dp^2} \right|_{p_c} = 0$$



# 13 Fraktale

## 13.1 Fraktale Dimension

$$\text{Masse } M(R) \sim R^D$$

R - ein Radius (z.B. Kreislinie, Kreisfläche, Kugel, ...)

$$\text{Massendichte } \rho \sim M/R^d$$

d - euklidische Dimension

$$\rho \sim R^0 = \text{const}, \text{ wenn } D = d$$

⇒ Objekt ist kompakt

$$\rho \sim R^{D-d} \text{ für } D < d$$

⇒ fraktal

Mandelbrot 1970ff

”Fractals are curdled” → Bild der geronnenen Milch in Kaffee

bei  $p_c$

Löcher in allen Größenordnungen

$$R \rightarrow Rb \Rightarrow \rho \sim (Rb)^{D-d} \sim R^{D-d}$$

*skaleninvariant Selbstähnlichkeit*

Perkolationscluster: nicht exakt erfüllt, sondern zufälliges/statistisches Fraktal

$$\langle M(R) \rangle \sim R^D$$

Mittelung über Realisierungen

Leath-Algorithmus: Einzel-Cluster-Wachstum

1. 1 Platz besetzt, bestimme Rand  $g$  (für *growth*)  
 $g$ : berührte, unbesetzte Felder
2. Wähle Randplatz; wähle Zufallszahl  $r$   
 $r \leq p$ : Platz besetzen  
 $r > p$ : Platz bleibt leer:  $x$
3. Stopp, wenn Perkolationscluster geschaffen wurde

SingleClusterApp  
 $m(R)$  im Ring um Keim,  
 $R \leq L/2$

$$M(R) = \sum_{R'=0}^R m(R')$$

plots:

$\log \sum m$  in Abhängigkeit von  $\log R \Rightarrow D$

besser:  $\log M$  vs.  $\log r$

$r$  - Abstand vom Schwerpunkt

$$r_{CM} = \frac{1}{N} \sum_i r_i$$

$N$  - Masse für  $R \rightarrow \infty$   
 Skalenrelation:

$$M(L) \sim P_{\infty}(L) L^d$$

für

$$L \sim \xi \sim (p - p_c)^{-\nu}$$

$$L^d \sim (p - p_c)^{\beta} L^d$$

$$L^D \sim L^{\beta/\nu} L^d$$

$$D = d - \beta/\nu = 91/48 \approx 1.896$$

*Fläche wird fast vollständig gefüllt*

## 13.2 Exakte Fraktale

### 13.2.1 Koch-Kurve

- Einheitslinie
- Mitte rausschneiden
- Durch zwei Linien der Länge  $1/3$  zu einem verbundenen Gebilde ersetzen
- Rekursion über alle Linien

KochApp

### 13.2.2 Box-Counting-Algorithmus

Maßstab der Länge  $l \rightarrow \text{Box}$

Beispiel: Linie in  $N$  Segmente der Länge  $l$  zerlegen:

$$N = 1/l$$

Quadrat in  $N$  Kästen der Länge  $l$  zerlegen:

$$N = 1/l^2$$

$$\text{allgemein} : N = 1/l^D$$

$$D = \frac{\log N}{\log \frac{1}{l}}$$

Kochkurve in  $N = 4^n$  Segmente der Länge  $l = \frac{1}{3}^n$

$$\Rightarrow D = \frac{n \log 4}{n \log 3} \approx 1.2619$$

### 13.2.3 quadratische Koch-Kurve

$$D = \log 5 / \log 3 \approx 1.465$$

### 13.2.4 Sierpinski-Dreieck

$$D = \log 3 / \log 2 \approx 1.585$$

### 13.2.5 Sierpinski-Teppich

$$D = \log 8 / \log 3 \approx 1.893$$

### 13.2.6 Sierpinski-Schwamm

Tetraeder

Wurde nie von Sierpinski publiziert

$$D = \log 4 / \log 2 = 2$$

$\Rightarrow$  ganzzahlige Dimension, aber fraktales dreidimensionales Objekt

Es gibt eine dichte orthogonale Projektion über eine Seitenmittenachse

$\Rightarrow$  Bild ist in zwei Dimensionen kompakt

Objekt ist allerdings komplett offen, wenn unendlich iteriert wurde

*lichtdurchlässig*

### 13.2.7 Mengerschwamm

Würfel

$$D = \log 20 / \log 3 \approx 2.727$$

Topologische Dimension aller (unendlichen) Objekte ist genau 1  
*Menge von Linien*

## 13.3 Fraktales Wachstum

Veranschaulichung von Krankheitsausbreitung anhand des Leath-Algorithmus'  
Nachbarzellen können auch zeitgleich ausgewertet werden.

### 13.3.1 Eden-Modell (1958)

Leath-Algorithmus mit  $p = 1$

Wachstum von Tumoren oder Bakterienkolonien

### 13.3.2 Invasions-Perkolation

- Alle Plätze erhalten eine Zufallszahl zugewiesen
- linker Rand wird komplett besetzt
- von allen unbesetzten Nachbarn wird der mit der niedrigsten Zahl besetzt
- Iteration bis Perkolation

Invasion (OSP) linearSearch vs. binarySearch

### 13.3.3 Zufallswanderer auf Perkolationscluster

Beispiel: Diffusion auf ungeordneten Strukturen

*Ameise-im-Labyrinth-Modell*

- Ameise sitzt auf besetztem Platz
- Ameise wählt zufällig einen Nachbarplatz
- Ameise bewegt sich dorthin, falls Platz besetzt
- Ameise ruht sonst auf ihrem Platz (auch zeitlich)

⇒ Diffusion auch auf der richtigen Zeitskala

Auswertung (kurze Wiederholung):

- $\langle R^2(t) \rangle$  // Mittelung über Anfangsplätze

- $\langle R^2(p) \rangle$  // Mittelung über Konfigurationen

$$p = 1 \Rightarrow \langle R^2 \rangle = 2dD_s t$$

$D_s$  - Diffusionskonstante

was, wenn  $p_c < p < 1$ ?

$$\langle R^2 \rangle = 4D_s(p)t$$

$\Rightarrow$  Wahrscheinlichkeitsabhängigkeit

Vermutung

$$D_s(p) \sim (p - p_c)^{\mu_s}$$

Leitfähigkeit  $\sigma$  von ungeordneten Materialien

Einstein: Mobilität  $\langle v \rangle / F \sim D = D_s$

$\langle v \rangle$  - Mittlere Teilchengeschwindigkeit

F - äußere Kraft

D - Diffusionskoeffizient

$D_s$  - Selbstdiffusionskoeffizient des Modelles

$D_s$  gilt auf Perkulationsclustern

D auf Gesamtsystem (mit allen Clustern)

$$D = P_\infty D_s$$

$$(p - p_c)^{\mu} \sim (p - p_c)^{\beta} (p - p_c)^{\mu_s}$$

$$\Rightarrow \mu = \beta + \mu_s$$

$$\text{Skalenrelationen, z.B. } z = 2 + \mu_s/\nu = 2 + (\mu - \beta)\nu$$

*Zu Random Walk auf Perkulationscluster*

Lässt sich auch exakt behandeln:

Mastergleichung auf Perkulationscluster. *Myopische* vs. *kurzsichtige* Ameise

#### 13.3.4 DLA - Diffusion Limited Aggregation - Diffusionsbegrenztes Wachstum

- Schneeflocken
- Blitze
- Gasentladungen
- Bruchentwicklung (Geologie, Materialwissenschaften)
- Bakterienkolonien

Häufig eingesetzt, wenig spezialisiert.  
Wie wächst eine Schneeflocke?

- Keim
- Wassermoleküle im Wasserdampf diffundieren
- Anlagerung an Keim bei Kontakt
- Dichte der Wassermoleküle sinkt lokal
- Diffusion für weiteres Wachstum nötig

DLAApp

1981 T.A. Witten & L.M. Sander

Idee:

- Keim
- Random Walk von weit außerhalb
- Wanderung, bis Nachbarplatz erreicht, dann Einfrieren
- Iteration

Parameter:

- startRadius
  - Groß: Lange Random Walks
  - Klein: Bias
  - beispielsweise  $startradius = R_{max} + 2$
  - $R_{max}$  = Ausdehnung des Clusters vom Keim ausgehend
  - $R_{max}$  in Relation zum Schwerpunkt benachteiligt schnell gewachsene Äste
- ringSize
  - Bewegungsraum für Abkürzungen
  - Ring um Startposition, in den anstatt vieler Wanderschritte gesprungen wird
  - Zeit ist bei DLA uninteressant
  - im Allgemeinen ein wenig kleiner als der Mindestabstand vom Cluster
- maxRadius
  - Abbruchkriterium
  - z.B.  $2 * R_{max}$

Systeme sind im Allgemeinen selbstähnlich

Mögliche Darstellungen:

- gesamter Baum (alle Zellen)
- Nur die letzten x angelagerten Zellen → Approximation des Randes

Analytische Betrachtung möglich, aber nicht sinnvoll, weil enorm aufwendig.

*Fluktuationsschwächung Noise reduction*

Erst die m-te Anlagerung wird ausgeführt. Random Walks werden durchgeführt. Erst, wenn ein Randplatz m mal angelagert wird, wird die Anlagerung auch ausgeführt. Dadurch wachsen die Spitzen langsamer und die fraktale Dimension steigt.

$$D_{\square} \approx 1.5 \text{ (gibt auch 1.61)}$$

$$D_{\triangle} \approx 1.71$$

$$D_{Kont.} \approx 1.71 \text{ (Zufall, dass beinahe identisch)}$$

$$D_{3d-Kont.} \approx 2.5$$

Keine Universalität, weil Anisotrop

### 13.3.5 Singularitätsspektrum

Fjorde  $\rightarrow$  Abschirmung

Quantifizierung: Abschirmungsgrad  $\alpha$

Annahme kreisförmiger Cluster:

Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen an bestimmter Stelle i auftritt:

$$P \propto 1/R$$

$$DLA - Cluster P_i \propto 1/R^{\alpha_i}$$

$$Kreis : \alpha_i = 1$$

$$Fjord : \alpha_{max}$$

$$Spitze : \alpha_{min}$$

$\Rightarrow$  Quantitative Beschreibung

Häufigkeit für  $\alpha$ -Werte aus  $[\alpha, \alpha + \delta\alpha]$

(kontinuierliches Histogramm)

$$N(\alpha) \propto R^{f(\alpha)}$$

DLA im 2d-Kontinuum:

Diagramm f über a

Halbkreisartige Kurve von 0.6 bis 9 ( $\alpha$ ) und Maximum bei 1.71

(charakteristischer Wert)

Multifraktalität:

Universelle Kurve, falls Modelle in wesentlichen Merkmalen übereinstimmen.

verbesserte DLA  
 ein Schritt mit großer Reichweite  
 Meakin 1985

Rechenzeit  $\log R^2$  statt  $R^2$

statt Kreis Quadrat benutzen  
 aber Randplätze nicht äquivalent

Begriff: *Coarse Graining*

Vergroberung der Betrachtungsweise und Durchführen eines Zufallsschrittes auf dem größeren Gitter.

CCA (Cluster-Cluster Aggregation)

Einzelne Cluster werden bewegt und aggregieren, wenn sich beide Cluster berühren.

### 13.3.6 Laplace'sches Wachstum

→Laplace-Gleichung Diffusionsgleichung

$$D\nabla^2 f = \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$Hier : \frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

Wachstumswahrscheinlichkeit P

$$\nabla^2 P = 0$$

Kapitel 10: Gleichung gelöst durch einen Random Walker  
 Jetzt: Gegenrichtung  
 siehe Kapitel 10

### 13.3.7 Laplacesches Wachstum (Algorithmus)

1. Ladung in Ursprung setzen  $V=0$   
 Rand:  $V=1$  (Kreis mit R)
2. Relaxationsmethode, um  $V_i$  an allen Plätzen i zu bestimmen
3. Zufallszahlen  $r_i$  - breakdown coefficients (inhomogenes Wachstum)
4.  $r_i V_i^a$   
 a ist ein Wachstumsparameter  
 a = 1 ist eine nette Wahl  
 a = 1/4 erzeugt eine gute Darstellung von Blitzen
5.  $\max(r_i V_i^a)$  mit  $i \in Rand$   
 ⇒ Clusterwachstum  
 ⇒ hier passiert der Breakdown  
 ⇒  $V_i = 0$



6. Relaxation, aber nur für alle  $0 < V_i < 1.0$   
(alle Zellen ohne Rand und Cluster)

7. Iteration ab 4.

$a = 1/4$  : Blitze fraktal:  $M(b) \sim b^D$  b - box size  
 $a = 1/3$  und  $a = 1/6$ : D hängt von a ab

### 13.3.8 Oberflächenwachstum

*selbstaffin* statt *selbstähnlich*

$\Leftrightarrow$  Skalierung ist anisotrop

Querschnitt: Linie L

Untersuchte Größen:

- mittlere Höhe
- RMS-Rauheit

$$\bar{h} = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} h_i$$

$$w^2 = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} (h_i - \bar{h})^2$$

$$\text{Rauheit } w(L, t) \sim t^\beta$$

beschreibt Korrelationen in vertikaler Richtung  
 große Zeiten: Gleichgewicht (steady state)

$$w(L, t \gg 1) \sim L^\alpha$$

$\alpha$  - Rauheitsexponent  
 anisotrope Skalierung:

$$L \rightarrow Lb$$

$$h \rightarrow hb^\alpha$$

Eden-Modell:

1. Randplatz zufällig wählen und besetzen
2. Iteration

Diagramme:

$\log w$  über  $\log t$

Gerade von Ursprung in den ersten Sektor

in Abhängigkeit von  $\beta$ : Linien gerade nach rechts

Übergang (A):

$\log \frac{w}{L^\alpha}$  über  $\log t$

parallele Gerade von  $\log \frac{w}{L^\alpha} \geq 0$  in ersten Sektor

bei bestimmter Höhe konstante Gerade

Übergang (B):

$\log \frac{w}{L^\alpha}$  über  $\log \frac{t}{L^z}$

wie das erste Diagramm, aber unabhängig von  $\beta$

Hinweis: Die Knicke sind in der Untersuchung natürlich abgeflacht

$$\text{Skalenrelation } w \approx L^\alpha f\left(\frac{t}{L^{\frac{\alpha}{\beta}}}\right)$$

crossover  $t_c$ : Zeiten, bei denen der Knick im ersten Diagramm statt findet

$$\beta = 1/3, \alpha = \frac{1}{2}$$

$$f(x) = Ax * \beta \text{ für } x \ll 1$$

$$f(x) = \text{const} \text{ für } x \gg 1$$

Diagramm, welches darlegt, dass das dritte Diagramm tatsächlich von  $\beta$  unabhängig ist.

$$\xi \sim t^{1/z} \text{ für } x \ll 1$$

$$\xi \sim L \text{ für } x \gg 1$$

Fluktuationen erkennbar (und notwendig sowie unvermeidbar, wie vorher gezeigt)

### 13.3.9 random deposition methods

1. Zufällige Position auf der Grundlinie wählen
2. Teilchen von oben auf die Oberfläche fallen lassen
3. anhand von Nachbarschaftsregeln für jede Zelle, die das Teilchen durchschreitet, entscheiden, ob das Teilchen weiter fällt oder liegen bleibt
4. Iteration

**random deposition** (einfachste Regeln) Bleibt liegen, wenn Zelle darunter besetzt.

$h_i$  Poisson-Verteilung

$$\bar{h} \sim t$$

$$\beta = \frac{1}{2}$$

$$\alpha = 0$$

**ballistic deposition**

Bleibt zusätzlich liegen, wenn Zelle links oder rechts besetzt  $\Rightarrow$  Festkleben  $\Rightarrow$  Überhänge und Poren

Abwandlung: Es können auch längere vertikale Stangen fallen

Auch diagonale Grundlinien möglich, aber dennoch vertikale Deposition  $\Rightarrow$  Poren sind tiefer und wachsen nur schwer zusammen

## 13.4 Fraktale im Chaos

Wiederholung logistische Abbildung

$$x_{n+1} = 4rx_n(1 - x_n)$$

$r > r_\infty = 0.8925\dots$  chaotisches Verhalten

seltsamer Attraktor für chaotische Bahnen

box-counting Gesamtanzahl Boxen  $l^d$  Gesucht: Anzahl der Boxen, in denen ein Stück der Trajektorie zu finden ist

$$N(l) \sim l^{-D} \text{ für } l \rightarrow 0$$

D - gesuchte fraktale Dimension

Für logistische Abbildung liegen alle Werte zwischen 0 und 1  $\Rightarrow$  einfachere Betrachtung

Zu kleine Boxen: Auflösungsprobleme, Speicherprobleme Zu große Boxen: keine Aussagekraft, beschränkter Bereich

Bei komplexeren Problemen steigen die Datenmengen noch schneller  $\Rightarrow$  schwierige Auswertung

**Korrelationsdimension**  $D_c$

betrachten N Punkte der Bahn

$N_i(r)$  : Anzahl der Punkte im Abstand  $\leq r$  von Punkt i

Korrelationsfunktion:

$$C(r) \equiv \frac{1}{N} \sum_i N_i(r) / N - 1 \sim r$$

$C(r \approx 0) = 0$ , weil Abstand der Punkte endlich  $C(r \text{ groß}) \rightarrow 1$ , weil Bahn lokalisiert (zwischen 0 und 1)

# 14 Komplexe Systeme

## 14.1 Zelluläre Automaten

### 14.1.1 von Neumann & Ulam 1948

Wollten damit biologische Systeme (Zellen) simulieren

Ort, Zeit und Zustände werden diskretisiert (Gitter, Einheitszeitschritt, endliche Menge)

Ausschließlich lokale Nachbarschaft

gleichzeitige Aktualisierung

OSP: OneDimensionalAutomatonApp

periodische Randbedingung

boolescher ZA

>>> - bitshift (3 >)

<< - bitshift (2 <)

& - bitwise and

| - bitwise or

^ - bitwise xor

nette Regeln:

90

129

150

Hier: insgesamt 256 boolesche Automaten mit nächsten Nachbarn

Wolfram 1984: Katalog

### 14.1.2 allgemeiner

$2z+1$  Nachbarn

viele ZA, also mögliche Einschränkungen

- Symmetrie
- $000 \rightarrow 0$
- nur abhängig von Summe, nicht Reihenfolge

4 Kategorien (für große Zeiten):

i. homogen

ii. separate stabile oder periodische Regionen

- iii. chaotische aperiodische Muster
- iv. komplexe, lokale Strukturen (dürfen aussterben)
- Z=1 → tauchen nie auf
- Z=2 → nur zwei mal

andere Regelnotation:

Summe = ... 3, 2, 1, 0 ⇒ Regel ... b3, b2, b1, b0

für z=1:

i. Regel 8 - Regel 1000<sub>2</sub>

ii. Regel 4 - 0100<sub>2</sub>

iii. 10 - 1010<sub>2</sub>

für z=2:

iv. 20 - 010100<sub>2</sub>

iv. 52 - 110100<sub>2</sub>

### 14.1.3 ZA in 2 Dimensionen

z.B. auf NN beschränkt:

2<sup>9</sup> = 512 Konfigurationen

Conway's Game of Life

LifeApp

Summe = 2 oder 3: 1 → 1, sonst → 0

summe = 3: 0 → 1

sonst 0,1 → 0

### 14.1.4 Verkehrsmodelle

General Motors:

Kontinuumsmodelle, Differentialgleichungen

ZAs: bedeutend einfacher und flexibler

### 14.1.5 Nagel-Schreckenberg

Uni Duisburg

$x_i$  Platz von Wagen i

$v_i$  Geschwindigkeit von Wagen i

4 Regeln:

$$1. v_i \rightarrow v_i + 1, \text{ falls } v_i < v_{\max}$$

$$2. v_i \rightarrow d - 1, \text{ falls } v_i \geq d(\text{Abstand zum Vordermann})$$

$$3. v_i \rightarrow v_i - 1(\text{Trödelfaktor})$$

$$4. x_i(t+1) = x_i(t) + v_i$$

FreewayApp

1 Spur mit Randbedingungen  
Verschiedene Erweiterungen

- Mehrspurige Straßen
- Spurwechsel
- Ein- / Ausfahrten
- Unterschiedliche Maximalgeschwindigkeiten (LKW's)

Beobachtungen:

- Fluss (Wagen pro Zeiteinheit)
- Geschwindigkeitshistogramme
- Staulänge und -ausbreitung

[www.autobahn-nrw.de](http://www.autobahn-nrw.de)

## 14.2 Selbstorganisierte Kritikalität

Seltene Ereignisse Folge intrinsischer Dynamik

- Erdbeben
- Lawinen
- Börsencrash
- Untergang des Römischen Reiches

System "kritisch": Anzahl der Ereignisse  $N(s) \sim s^{-\alpha}$   
 $s$  - Stärke (Energie im Erdbeben, Schneemenge in Lawine, ...)  
Potenzgesetz ist skaleninvariant (nur Vorfaktor)

### 14.2.1 Gegenbeispiel Gauß

$$N(s) \sim e^{-s/s_o^2}$$

SandpileApp

- Wähle Platz auf Gitter
- erhöhe Wert um 1
- wenn Wert == 4: Umkippen  
Nachbarn: +1  
Selbst: 0

- offene Randbedingungen

$$\alpha = 1.0$$

statistisches Gleichgewicht  
 (nur statistisch stationär)  
 Lawinen aller Skalen  
 kritische Höhe: 4  
 (eigentlich: Für Vergleich mit Experiment nicht Höhe, sondern Steigung relevant)  
*Simulation passt schon ganz gut*  
*selbstorganisiert:*  
 Es werden keine äußeren Parameter angepasst  
 Erdbeben:  $N(E) \sim E^{-b}$

$$b \approx 1$$

Gutenberg-Richter  
 gilt bei weltweiter Erdbebenanalyse  
 Bak-Tang-Wiesenfeld-Modell:  
 Kraft  $F_{ij}$  anfangs zufällige, kleine Werte  
 (Spannung zwischen tektonischen Platten)  
 $\delta F$  wird langsam erhöht  

$$\delta F = 10^{-3} \forall (i, j)$$

$$F_{ij} > F_c = 4 \Rightarrow F_{ij} \rightarrow F_{ij} - F_c$$

und auf 4 nächste Nachbarn verteilt  
 F kaskadiert  
*Waldbrände*  
 Gitter, periodische Randbedingungen  
 anfangs Bäume mit Wahrscheinlichkeit p  
 Feuer mit Wahrscheinlichkeit p  
 Platz leer  $\Rightarrow$  Baum wächst mit Wahrscheinlichkeit g (growth)  
 Feuer breitet sich auf Nächstnachbarn aus  
 Platz wird leer, wenn es im vorigen Schritt gebrannt hat

Anzahl Plätze  $s_b$   
 Anzahl brennende Bäume  $s_f$   
*Selbstmittelung*  $\Leftrightarrow$  Ergodenhypothese

weitere Beispiele im Buch

- Alterungsprozesse
- Immunsysteme

- Börsencrashes
- Fußgängerbewegungen  
Evakuierungssimulationen  
Überraschendes Ergebnis:  
Oftmals ist es günstiger, Hindernisse in den Weg zu bauen  
Säule vor Ausgang  $\Rightarrow$  Gedränge vor Ausgang wird gebrochen

## 14.3 Neuronale Netze

- Mustererkennung
- manchmal Steuerung

HopfieldApp

### 14.3.1 Hopfield-Modell

$N$  Neuronen  $S_i = \pm 1$  (Feuern / nicht feuern) Zustand  $i$

$S^\alpha = S_i^\alpha$  Zustand  $\alpha$  des Netzes

Stärke der  $i$ - $j$ -Verbindung

$$w_{ij} = \sum_{\alpha=1}^M S_i^\alpha S_j^\alpha$$

Dynamik: wähle zufälliges  $i$

$$S_i = +1 \text{ wenn } \sum_{j \neq i} w_{ij} S_j > 0$$

–1 sonst

(Input der anderen Neuronen wird aufsummiert)

anfangs: Muster speichern

zufällige  $S_i$  wählen

Hopfield versucht, iterativ ihm bekannte Muster wieder herzustellen

*Hamming*-Abstand  $h$ : Anzahl der falschen Bits

$h(t)$  sollte abnehmen

auch interessant:  $h$  vs. Neuronen und  $h$  vs. Erinnerungen

viele Neuronen  $\Rightarrow$  Erkennungsrate steigt (theoretisch)

viele Erinnerungen  $\Rightarrow$  Erkennungsrate wird drastisch schlechter

Dimensionalität ist aktuell irrelevant

Lokalität der Verbindungen ist praktisch ebenfalls irrelevant



## 14.4 Wachsende Netze

Netz = Knoten und Verbindungen (Graph)

kurze Beispielserie:

zyklisch vs. azyklisch

gerichtet vs. ungerichtet

gewichtet vs. ungewichtet

### 14.4.1 Erdős-Reny-Modell

$N$  Knoten  $n$  Verbindungen

$$p = \frac{n}{\frac{N(N-1)}{2}}$$

Wahrscheinlichkeit für Verbindung

Es können unterschiedliche Teilnetze entstehen

gesucht:  $D(l)$ : Anteil der Knoten mit  $l$  Verbindungen

$$N \text{ groß} \Rightarrow D(l) \rightarrow \text{Poisson}$$

Vergleich mit Perkolation, aber: Nur Verknüpfungen werden interessant, nicht die Orte  
Riesencluster:

- umfasst mindestens 10% (beliebig) aller Knoten
- 3 (beliebig) mal größer als der nächstgrößte Cluster

Struktur: Cluster-Koeffizient  $C(N)$

(Transitivität)

$$\frac{\text{Anzahl Dreiecke}}{\frac{\text{Anzahl möglicher Tripel}}{3}}$$

Je Knoten in Abhängigkeit von  $l$

$$= \frac{l!}{2^{l(l-2)!}} = 0, 1, 3, 6 \dots$$

$$l = 1, 2, 3, 4 \dots$$

### 14.4.2 Small-World-Network

Jeder ist mit jedem über nicht mehr als 6 Ecken bekannt

1920er: empirisch durch Paketversand bestätigt

$$\bar{L} \sim \log N$$

**Watts-Strogatz-Modell**

- anfangs Gitter mit nächste-Nachbar-Verbindungen
- Verbindung wird mit Wahrscheinlichkeit  $p$  gebrochen und neu zwischen beliebige Knoten gesetzt

$$\bar{L} \sim \log N \text{ für große } p$$

$$\bar{L} \sim N \text{ für kleine } p$$

$$Np_c^{\frac{1}{d}} \approx 1$$

**14.4.3 Barabasi-Albert-Modell**

Preferential Attachment

Modell ist small world network

$$\bar{L} \sim \log N$$

Modellierung von sozialen Netzwerken mit bevorzugten Bindungen  $\Rightarrow$  Clusterbildung

Neuer Knoten erhält Verknüpfungen mit Wahrscheinlichkeit  $\sim l_i$

$l_i$  - Anzahl der Verbindungen (Links) des  $i$ -ten Knotens

OSP: Preferential Attachment

$$D(l) \sim l^{-\alpha}$$

**14.5 Genetische Algorithmen**

Bestandteile:

- genetischer Code (Genotyp) (Bitfolge)
- Ausführung des genetischen Codes (Phenotyp) (Spinfolge im Ising-System)

Genetischer Algorithmus:

- zufällige Änderung des Genotyps
- Auswahlkriterium des Phenotyps: Fitness

Anzahl  $G$  von Genotypen (Größe der Population)

$n$  = Generation = Zeit

Mutationen: Änderung eines Bits

Sexuelle Reproduktion:

Rekombination und Kreuzung

$\Rightarrow$  Mischung von Teilen der Bitfolgen der Eltern

Fitness:

Abhängig von Wechselwirkung mit Umgebung

### 14.5.1 Beispiel: Ising-Modell

Gitter mit  $N = L^2$  Spins  $S_i = \pm 1$

$$E = \sum_{i,j}^{n.N.} J_{ij} S_i S_j$$

$$J_{ij} = \pm 1$$

$$E_{min} = -2N$$

$$E_{max} = 2N$$

Fitness:

$$2N - E$$

$\Rightarrow$  minimalste Energie hat höchste Fitness (ist sinnvoll)

$\sim$  Wahrscheinlichkeit der Auswahl einer Bitfolge

GeneticApp

GenePool

recombine()

mutate()

Phenotype

$$Ferromagnet J_{ij} \equiv 1$$

$$Antiferromagnet J_{ij} \equiv -1$$

$$Spinglas J_{ij} \equiv \pm 1 \text{ zufällig}$$

*Frustration* Zellen haben entgegengesetzte  $J_{ij}$  ihrer Nachbarn, so dass sie mehrere Möglichkeiten haben, die geringste Energie zu bilden

Auch hier: Zellulärer Automat, da nur diskrete Werte möglich sind und eine zeitgleiche Aktualisierung erfolgt.

## 14.6 Modelle der Meinungsbildung

Beispiel: Wahlergebnisse

Wähler anfangs  $\emptyset(i) = \pm 1$

O - Opinion

Gitter: zufälliger Platz (Wähler) i

zufälliger Nachbar j von i

O(i)

$\Rightarrow$  Konsens stellt sich unweigerlich ein

Zeit bis zum Konsens  $\sim N \log N$

Erweiterung:

Netzwerk mit preferential attachment.

Ändert sich was?

### 14.6.1 Sznajd-Modell

Gitter, anfangs  $O_i = \pm 1$  i zufällig, j-ter Nachbar zufällig  
 wenn  $O_i = O_j$ , dann alle 6 Nachbarn überzeugt  
 $\Rightarrow$  peer pressure  
 mehr Werte für  $O(i)$ : nicht unbedingt Konsens  
 Auch hier naheliegend, ein PA-Netzwerk zu untersuchen

### 14.6.2 Minority Game

N Spieler  
 Aktionen 0, 1  
 Strategie in Abhängigkeit der letzten m Iterationen  
 Beispiel:  
 m=2  
 $2^m = 4$  mögliche Vergangenheiten  
 Information über die Aktion, die von der Minderheit gewählt wurde  
 $2^4$  mögliche Strategien

anfangs: jeder Spieler wählt mindestens 2 Strategien zufällig aus  
 Leistung der Spieler wird um 1 erhöht, wenn Strategie zur Minderheit beiträgt  
 beste Strategie ausführen, Leistung erhöht (oder nicht)  
 bestes mögliches Ergebnis:  
 Minderheit  $(N-1)/2$   
 möglichst groß  
 $N_1(k)$  Anzahl der Aktionen 1 in Iteration k

$$\sigma^2 = \sum_k (N_1(k) - \langle N_1 \rangle)^2$$

nehmen ab mit wachsender Effizienz  
 Phasenübergänge zwischen Kooperativem Verhalten und individuellem Verhalten  
 Skalierung: universelle Kurve  $\sigma^2/N$  in Abh. von  $2^m/N$

## 14.7 Gittergasmodelle für inkompressible Flüssigkeiten

statt Navier-Stokes-Gleichung im Kontinuum  
 hier: Zellulärer Automat Dreiecksgitter  
 $m = \text{const}$   
 Geschwindigkeit  $|v| = \text{const}$   
 6 Richtungen (zeitgleich)  
 bestimmte Entwicklungsregeln  
 bis zu 6 Teilchen auf Gitterplatz  
 Ruhe  
 ein Teilchen liegt lokal in Ruhe

Barriere

Teilchen wird zurück geworfen

Impulserhaltung

Freie Bewegung zwischen Gitterplätzen

Stoßregeln

mikroskopisch nicht genau

makroskopisches Verhalten stimmt

⇒ 8 bit pro Zelle notwendig

## 15 Monte-Carlo-Simulationen

Monte Carlo: Das erste Mal im Atombombenprojekt in WWII (Codename Monte Carlo) eingesetzt.

Standardverfahren der Mechanik

Flüssigkeiten, Gase, Wachstum, ... alles halt

### 15.1 Mikrokanonisches Ensemble

$N = \text{const}$   $V = \text{const}$   $E = \text{const}$  - Makrozustand

Konfigurationen (Anzahl  $\Omega$ ) - Mikrozustände

$$\text{Wahrscheinlichkeit } P_S = 1/\Omega$$

Beispiel: 4 Spins ohne Wechselwirkung

$$E = -\mu B \sum_i s_i$$

$$s_i = \pm 1$$

Quasi-Ergoden-hypothese

$$\text{Ensemble - Mittel } \langle A \rangle = \sum_{S=1}^{\Omega} A_S P_S$$

statt Zeitmittel

Größere Systeme nicht mehr abzählbar

Creutzalgorithmus (Gitter-Eich-Theorie)

Monte-Carlo mit zusätzlichem Freiheitsgrad (*Dämon*, erlaubt Energietransfer)

IdealDemonApp ideales Gas,  $N$  Teilchen, Masse  $m_i$ ,  $E = \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2$

1. zufällig Teilchen  $i$  wählen und  $v_i$  ändern  
nur Geschwindigkeit  $v_i$  muss neu bestimmt werden (kein Ort)
2.  $\Delta E$  berechnen
3.  $\Delta E \leq 0$ : akzeptiere,  $E_d + \Delta E$
4.  $\Delta E > 0$ : akzeptiere, aber  $E_d - \Delta E$ , wenn  $E_d > \Delta E$

$$\frac{1}{2}m \langle v_i^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$$

Gleichverteilungssatz

$$E = 3/2 N k_B T$$

3: Dimension

N - Teilchenzahl

3N - Freiheitsgrade

$E_d$  - Energie des Dämons

$$\log P(E_d) \sim -E_d$$

Boltzmann-Verteilung

$$P(E_d) \sim e^{-E_d/k_B T}$$

Idee: Dämon nimmt Energie aus System auf und gibt sie bei Bedarf wieder ab. Somit ist der Dämon ein weiterer Freiheitsgrad, der in direktem Zusammenhang mit der Temperatur steht.

### 15.1.1 Kanonisches Ensemble

In der Natur ist das aber anders: Umgebung = Wärmebad

$\Rightarrow$  NVT,  $T = \text{const}$

betrachte Dämon = System

$P(E_d)$  ist Wahrscheinlichkeitsverteilung  $W(E_S)$  für Mikrozustände S im k.Ens. P: Boltzmann

$$P_S = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_S}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (\text{Abkürzung})$$

Z - Zustandssumme, partition function

$$Z = \sum_S e^{-\beta E_S}$$

$$\text{Freie Energie } F = -k_B T \log Z$$

(*Helmholtz-Potential*, liefert alle thermodynamischen Eigenschaften über Ableitungen)

Im Gleichgewicht ist F minimal

allgemein: System mit vielen Freiheitsgraden

$$k_B T = \langle E_d \rangle = \frac{\int_0^\infty E_d e^{\frac{-E_d}{k_B T}} dE_d}{\int_0^\infty e^{\frac{-E_d}{k_B T}} dE_d}$$

d.h. Dämon = Thermometer

$E_d$  kontinuierlich

$\infty \Rightarrow$  keine Grenze für  $E_d$

## 15.2 Ising-Modell

$$E = -J \sum_{i,j}^{n.N.} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

$\mu = 1$  zur Vereinfachung  
 B - externes Magnetfeld  
 J - Austauschwechselwirkung  
 $J > 0 \Rightarrow$  Ferromagnet  
 $J < 0 \Rightarrow$  Antiferromagnet

$$s_i, s_j = \pm 1$$

$$\text{Magnetisierung } M = \sum_i s_i$$

$$\text{magnetische Suszeptibilität } \chi = \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right|_{B=0}$$

$T > T_{Curie} : \langle M \rangle = 0$  ungeordnetes System  
 IsingDemon d=1, periodische Randbedingungen

Dynamik:  
 Spin-Flip  
 Zeit: Monte-Carlo-Zyklen  
 $= N * \text{Monte-Carlo-Schritt}$   
 (Gesamtes System kann ein Mal geändert werden)  
 $\Rightarrow$  unabhängig von der Systemgröße  
 Energieänderungen sind von Nachbarschaftsbedingungen abhängig  
 $\Rightarrow \pm 8J, \pm 4J, 0$   
 erstmal  $E_d = 0, 4J, 8J, \dots$   
 für  $B = 0$

$$x = 4J/k_B T$$

$$\begin{aligned} \langle E_d/k_B T \rangle &= \frac{0 + xe^{-x} + 2xe^{-2x} + \dots}{1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots} \\ &= x/e^{x-1} \end{aligned}$$

x einsetzen  $\Rightarrow$

$$k_B T/J = 4/\log 1 + 4J/\langle E_d \rangle$$

$$|J| \ll E_d \Rightarrow \langle E_d \rangle / J$$



für  $B \neq 0$ :

$E_d = 0, 2B, 4J \pm 2B, \dots$

- für  $J = mBx = 2B/k_B T \dots$

- für  $4J/2B$  irrational:  $E_d$  kontinuierlich

$\langle E_d \rangle = k_B T$

- für  $4J/2B = m/n$  rational

$k_B T/J = 4/m / \log 1 + 4J/m / \langle E_d \rangle$

interessant: Formel hängt nicht von  $n$  ab

Vorteile des Dämons

- Zufallszahlen müssen nicht sehr gut sein
- keine Berechnung der Exponentialfunktion (bei großen Dämonenergien)  
alles recht simpel
- $d \geq 1$ : sequentielles Update möglich  
ungewöhnliches Konzept, weil MC-Simulation ohne Zufallszahlen

Nachteile:

- Arbeit im mikrokanonischen Ensemble trotz Temperatur  
Frage: Wie erstellt man das passende Anfangssystem  
Observable sind temperaturabhängig  
Idee: unterschiedliche Anfangsbedingungen abtasten und  $E(T) / T(E)$  ermitteln

Verallgemeinerung (siehe Buch): *Anwendung für Wärmeffluss*

- eindimensionales Isingmodell
- für gewöhnlich mit DGL behandelt
- mehrere Dämonen
- Steady State-Simulation
- 1 Dämon pro Gitterplatz

Beispiel:  $i = 0 \Rightarrow$  Energie immer erhöhen, d.h. antiparallel  $s_0 \neq s_1$   $i = N-1 \Rightarrow$  Energie immer erniedrigen, d.h. parallel  $s_{N-1} = s_{N-2} \Rightarrow$  Wärmeffluss

Untersuchung: Temperatur in Abhängigkeit von Gitterplatz  $i$

$$k_B T/J = 4/\log 1 + \frac{4J}{\langle E_{d_i} \rangle}$$

$\Rightarrow$  Temperaturgradient zur weiteren Untersuchung

ManyDemonsApp

Untersuchung nur in Mitte der Kette sinnvoll, da Ränder stark von Einfluss dominiert

Energieffluss = Anzahl updates pro MC-Zyklus Wärmeffluss  $Q = \text{Energieffluss} / N$

$$Q = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}$$

$\kappa$  - thermische Leitfähigkeit

## 15.3 Metropolis-Algorithmus

kanonisches Ensemble NVT

$$\langle A \rangle \approx A_m = \sum_{s=1}^m A_s e^{-\beta E_s} / \sum_{s=1}^m e^{-\beta E_s}$$

Problem der Exponentialfunktion: besonders niedrige Energien werden benachteiligt.  
Importance Sampling:

$$= \sum_{s=1}^m A_s$$

'  $\Rightarrow$  s werden entsprechend der Boltzmannverteilung ausgewählt  
z.B. Ising

- anfangs  $s_0$  beliebig wählen
- Versuche Spin-Flips  $s_i \rightarrow s_j$
- $\Delta E = E_j - E_i$
- $\Delta E \leq 0 \Rightarrow$  akzeptiere  $s_j$
- $\Delta E > 0 \Rightarrow w = e^{-\beta \Delta E}$
- $r$  zufällig  $(0, 1]$
- $r \leq w \Rightarrow$  akzeptiere
- sonst: behalte  $s_i$
- $\langle A \rangle$  um  $A_s$  erhöht

Dynamik des Übergangs von  $s_i \rightarrow s_j$  mit Wahrscheinlichkeit  $W(i \rightarrow j) = \min(1, e^{-\beta \Delta E})$   
ungewöhnlich:

Nur das Verhältnis der Boltzmannfaktoren geht ein, nicht die Normierung.

Alternative Dynamik möglich:

$$W(i \rightarrow j) e^{-\beta \Delta E} = W(j \rightarrow i) e^{\beta \Delta E}$$

Bezeichnung dafür: Detailed Balance - Detailliertes Gleichgewicht

Detailed: gilt auf mikroskopischer Ebene

BoltzmannApp

z.B. ideales Gas, N Teilchen ohne WW

$\langle E \rangle(T) \Rightarrow$

$$c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

spezifische Wärme

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

$$c_v = \frac{\langle (\Delta E)^2 \rangle}{k_B T^2}$$

$$c_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \left( \frac{-1}{k_B T^2} \right)$$

$\Rightarrow$  lineare Antwort auf Temperaturänderung

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s} = \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \sum_s E_s e^{-\beta E_s} - \frac{1}{Z} \sum_s E_s^2 e^{-\beta E_s}$$

$$= \langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle \text{ Fluktuationen}$$

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

Terme: Lineare Antwort (Mitte) und Fluktuationen (rechts)

$$E_s = E_s|_{B=0} - B M_s$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s M_s e^{-\beta E_s}$$

$$\frac{\partial E_s}{\partial B} = -M_s$$

$$\frac{\partial Z}{\partial B} = \sum_s \beta M_s e^{-\beta E_s}$$

$$\langle M \rangle = 1/\beta \frac{\partial \log Z}{\partial B}$$

$$\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B} \sum_s M_s e^{-\beta E_s} + \frac{1}{Z} \sum_s \beta M_s^2 e^{-\beta E_s}$$

$$= -\beta \langle M \rangle^2 + \beta \langle M^2 \rangle$$

## 15.4 Ising-Modell, Metropolis-Algorithmus

d = 1 zufällige Spinflips

IsingApp (d=2)

Boltzmannfaktor w braucht Exponentialfunktion  $w(\Delta E)$  begrenzte Werte  $\Rightarrow$  Lookup-Table

2x2-Isingmodell  $\Rightarrow$  16 Zustände

Wunderbar abzählbar.

$$Z = 2e^{8\beta J} + 12 + 2e^{-8\beta J}$$

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z}(2 * 8e^{8\beta J} - 2 * 8e^{-8\beta J})$$

Einschub zu Korrelationen Energien benachbarter Zustände sind ähnlich  $\Rightarrow$  zeitliche Korrelation

suche statistisch unabhängige Messungen für  $\langle A \rangle$

$$\text{Autokorrelation } C_A(t) = \frac{\langle A(t+t_0)A(t_0) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Im Gleichgewicht sollte  $C_A$  nicht von  $t_0$  abhängen

Für große t sind  $A(t)$  und  $A(0)$  unkorreliert. Frage: Was ist ein großes t?

$$t \rightarrow \infty :$$

$$\langle A(t+t_0)A(t_0) \rangle \rightarrow \langle A(t+t_0) \rangle \langle A(t_0) \rangle = \langle A(t) \rangle^2$$

$$\Rightarrow C_A(t) \rightarrow 0$$

typischer Ansatz:

$$C_A(t) = e^{-t/\tau_A}$$

Korrelationszeit (eigentlich: Dekorrelationszeit, aber was soll's)

IsingAutoCorrelatorApp

$$\int_0^\infty C_A(t) dt = \int_0^\infty e^{-t/\tau_A} dt = -\tau_A e^{-\tau_A/t} \Big|_0^\infty = \tau_A$$

$$\tau_A = \sum_{t=1}^{\infty} C(t)$$

erhebliche numerische Vereinfachung. Problem:  $C(t)$  schwankt irgendwann um 0. In der Regel summiert man nur bis zur ersten Nullstelle

auch interessant: Stimmen Korrelationszeiten für Energie und Magnetisierung überein? Wie verhalten sie sich zur Relaxationszeit?

Sequentielles Update:

- spart Rechenzeit (bleibt superlinear)

- Korrelationszeit steigt  
Zustände sind ähnlicher

$$\text{Genauigkeit} \sigma_m = \sigma / \sqrt{n}$$

Standardabweichung des Mittelwertes

$$\sigma^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

unterschätzt Fehler wegen Korrelationen  
Messungen zusammenfassen

$$E_i^{(2)} = (E_{2i-1} + E_{2i})/2$$

$$\Rightarrow \sigma_m^{(2)} = \frac{\sigma^{(1)}}{\sqrt{n/2}}$$

$$? = \sigma_m^{(1)}?$$

ja  $\Rightarrow$  freuen

nein  $\Rightarrow \sigma^{(4)}$  oder  $\sigma^{(8)}$  betrachten, anschließend freuen

$$L = 8$$

$$T \approx T_c = 2 / \log 1 + \sqrt{2} \approx 2.269$$

$$L = 16$$

$$E/N = -1.45306 \text{ bei } T_c$$

## 15.5 Phasenübergang im Ising-Modell

Spin-Korrelationsfunktion

$$C(r) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

r - Abstand zwischen i und j Erwartung: Exponentieller Abfall

$$C(r) \approx e^{-r/\xi}$$

Ferromagnet,  $N \rightarrow \infty$ ,  $B = 0$

$$m(T = 0) = \pm 1$$

$$(m = M / N)$$

$$T > 0 \Rightarrow |m| < 1$$

$$T \rightarrow T_c \Rightarrow m \rightarrow 0$$

stetiger Phasenübergang (im Gegensatz zu Phasenübergang 1. Ordnung und deren Unstetigkeiten)

$$\text{Ordnungsparameter : } m(T) \sim (T_c - T)^\beta$$

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$$

$$c_v \sim |T - T_c|^{-\alpha}$$

auf beiden Seiten des Phasenübergangs herrscht der selbe Exponent  
Domänen

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$$

$$T \gg T_c : \xi \approx 1$$

finite-size-scaling: (L signifikant, wenn  $\xi \approx L$ )

$$T_c(L) - T_c(\infty) \sim L^{-1/\nu}$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}$$

$$c_v \sim L^{\alpha/\nu}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}$$

Problem:  $\alpha = 0$  für  $d = 2$

$$\nu = 1$$

$$\beta = 1/8$$

$$\gamma = 7/4$$

$$c_v \approx 0.4995$$

Zu Phasenübergang im Isingmodell

Dreiecksgitter

kritische Temperatur:

$$k_B T_c / J = 3.641$$

$$\nu = 1$$

$d = 3$  analytisch nicht lösbar (Unlösbarkeitsbeweis Istrail 2000)

$$k_B T_c / J = 4.5108$$

$$\beta = 0.32$$

$$\gamma = 1.24$$

$$\nu = 0.63$$

*Critical Slowing Down*

Die Verlangsamung der Simulation in der Nähe des Phasenübergangs

$$\tau \sim \xi^z$$

$$\tau \sim L^z \text{ bei } T_c$$

$z = 2.167$  in 2 Dim.

$\tau, z$  hängen von Dynamik ab z.B. Spin-Flip-Dynamik

*Dynamik*: mögliche Änderungen bei Metropolis-Algorithmus

CPU-Zeit  $\sim L^2$  für  $n$  Konfigurationen, d.h. bei  $T_c$ : CPU-Zeit  $\sim L^{2+z}$

bei lokaler Dynamik für  $n$  Konfigurationen

mögliche Optimierung: mehrere Spinflips gleichzeitig, aber gezielt ausgesuchte Spins, da sonst Verschlechterung

$f$  Spins gleichzeitig drehen, aber  $f$  Spins nicht zufällig, sondern geschickt im Cluster aussuchen

*Wolff-Dynamik* (single-cluster flip)  $\rightarrow$  globale Dynamik Bindungspertkolation  $p = 1 - e^{2J/k_B T}$

definiert Cluster, der geflippt wird, auf vorgegebenem Ising-Träger, auf dem verschiedene Cluster vorhanden sind

$$p_c \hat{=} T_c$$

Wolff-Dynamik erhält detailliertes Gleichgewicht richtig für statische Eigenschaften falsch für dynamische Eigenschaften (zu viele Schritte werden zeitgleich ausgeführt)

$$\text{mittlere Clustergröße } S = \sum_s s n_s \sim L^{\gamma/\nu}$$

$$\text{CPU-Zeit } \tau = \tau_{cf} S / L^2$$

$$\tau \sim L^z \sim L^{z_{cf}} L^{\gamma/\nu} L^{-d}$$

$$z = z_{cf} + \gamma/\nu - d \text{ mit } z_{cf} \approx 0.5 \Rightarrow z \approx 0.25$$

Swendsen-Wang-Algorithmus

- betrachte alle Paare mit parallelen Spins
- Bindung mit Wahrscheinlichkeit  $p$   
 $\Rightarrow$  mehrere Cluster
- Alle Cluster werden mit Wahrscheinlichkeit 0.5 umgekippt

auch Invasionsalgorithmus wurde schon zur Wahl der Cluster genutzt

Problem: Akzeptanz  $p_i = \min(1, e^{-\Delta E/k_B T})$

sehr klein für kleine Temperaturen

Lösung: der n-fache Weg

$$\text{Gewicht} Q = \sum_{i=1}^{N-1} p_i$$

wähle  $r$  zufällig aus  $[0, Q)$

$$\Rightarrow j, \text{ sodass } \sum_{k=0}^{j-1} p_k \leq r < \sum_{k=0}^j p_k$$

Spin  $j$  mit Wahrscheinlichkeit 1 gedreht

Klasseneinteilung, beispielsweise Ising in 2 Dimensionen:

nur 10 mögliche Werte von  $\Delta E$ , d.h. von  $p_i$

$j$  innerhalb der Klasse zufällig wählen

d.h.  $j \in (1, 2, \dots, n_\alpha)$

$$\sum_{\alpha=0}^9 n_\alpha = N$$

$$\sum_{\alpha=0}^9 n_\alpha p_\alpha = Q$$

Zeit  $\tau$ , bis Flip  $j$  auftritt:

wähle  $r'$  aus  $[0, 1)$ :

$$\tau \approx -N/Q \log r' \text{ für } Q \ll N$$

wichtig für dynamische Eigenschaften

Anwendungen des Ising-Modells Ising mit externem Magnetfeld  $B$

$$h = \beta \mu B$$

Demnächst merken wir, dass ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt

zu Ising: anfangs  $B=0$ , suchen Gleichgewicht

$$\text{dann } B_{n+1} = B_n + \Delta_B \Delta_B = 0.2/\beta \mu$$

volles Metropolis-Programm: Relaxieren, Bestimmung makroskopischer physikalischer Größen

$m$  - effektive Magnetisierung ( $M/N$ )

Diagramm:  $m$  über  $B$

linearer Anstieg von  $(0,0)$ , asymptotisch zu  $m=1$

Abbruch der Simulation sinnvoll bei  $m \approx 0.95$

$$\text{dann } B_{n+1} = B_n - \Delta_B$$



Hysteresis: System läuft auf veränderter Kurve zurück (z.B. leicht höher) dann erneute Umkehr  $\Rightarrow$  Symmetrisch zu zweiter Kurve  $\Rightarrow$  Schleife bildet sich, Nullpunkt wird umgangen

$\Rightarrow$  Magnetisierung hängt von Vorgeschichte ab

$m(B=0)$  : spontane Magnetisierung

$\Rightarrow$  Phasenübergang erster Ordnung, weil unstetig

$m(B)$  hat zwei Werte:

- absolutes Minimum der freien Energie: Gleichgewichtszustand
- relatives Minimum der freien Energie: Metastabile Zustand

schwierig: Nahe Phasenübergang abs. und rel. unterscheiden schwierig: Unterscheiden, ob Phasenübergang stetig oder unstetig *Man kann das beliebig lange simulieren*

$T > T_c$ : Kein Problem, weil ungeordnet und nicht weiter drüber nachdenken. (alles stetig) unterhalb: unstetig, also auch gewisse Schwierigkeit

interessante Simulation: Möglichkeit, diesen Phasenübergang mal zu untersuchen, indem sie anfangs (in blau als Beispiel),  $B = 0.3$  wählen und  $T = 4/9T_c$  (nicht zu nah am Phasenübergang). Relaxieren in Gleichgewicht, bis der Grundzustand erreicht wurde. Anschließend  $B = -0.3$  setzen. Unterschied zu vorher: Dort ist man in kleine Schritten zum nächsten Wert gegangen Fachbegriff: Quenching (Abschrecken, Schlagartige Änderung)  $\Rightarrow$  System landet direkt im metastabilen Zustand

$\pm 0.3 \Rightarrow$  auf Hysteresekurve schauen, ob es in der Mitte des anderen Armes der Kurve ist. Hier wurden die Daten günstig gewählt.

Natur will in absolutes Minimum

- Es entsteht ein Nukleationskeim
- Keim wächst (meistens nicht, Fluktuationen bzw. Verschwinden)  
*Nukleationszeit* - Zeit, die ein System braucht, um einen Nukleationskeim wachsen zu lassen

Man unterscheidet:

- homogene Nukleation  
spontane thermische Fluktuation
- heterogene Nukleation  
lokalen Cluster als Störstelle flippen (insert flipper theme song here)

### 15.5.1 Ising-Antiferromagnet

1. Untergitter

$$\text{mod}(x,2) + \text{mod}(y,2) == 1$$

2. Untergitter

$$\text{mod}(x,2) + \text{mod}(y,2) \neq 1$$

Betrachten versetzte Magnetisierung *staggered magnetisation*

$$M_s = \sum_{i \in 1.UG} s_i - \sum_{i \in 2.UG} s_i$$

⇒ typische Untersuchungen möglich

Man erhält einen Knick in  $\chi$  (Suszeptibilität)

$$T_N \approx 2.269;$$

*Neel-Temperatur* Keine Divergenz von  $\chi$

*Glauber-Dynamik* für Ising-Modell bei  $T = 0$  übliche Methode wähle i: Flip  $\rightarrow \Delta E$   
 $\Delta E > 0$ : akzeptieren  $\Delta E < 0$ : verwerfen  $\Delta E = 0$ : 50/50

Bei Ising nicht so oft, da  $T = 0$  nicht so spannend

*Gittergas*  $s_i = \pm 1$  entspricht A/B-Atom in Legierung oder besetzter/unbesetzter Platz  
 Phasentrennung: Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang Beispiel:  $\beta$ -Messing Herstellung: Oberhalb von 7XX K Gleichgewicht, anschließend schnell abschrecken (Quenching)

Bisherige Simulation funktioniert nicht, weil Atomzahl nicht gleich bleibt. ⇒ *Kawasaki-Dynamik* 2 benachbarte Spins tauschen  $\rightarrow \Delta E \rightarrow$  Metropolis

parallele Nachbarn bringen keinen Unterschied ⇒ Liste von  $\Delta E$  für  $\uparrow - \downarrow$  und  $\downarrow - \uparrow$ -Paare

$\langle E \rangle$  in Abhängigkeit von  $T$  stetig für kleine Dichten (von besetzten Plätzen bzw. von A-Atomen) unstetig für große Dichten

Selbstdiffusion  $1/2dt \langle R^2(t) \rangle \rightarrow D$  für  $t \rightarrow \infty$  auch parallele Nachbarn für  $t$  berücksichtigen

Quenching: *Spinodale Entmischung* z.B. binäre Legierung (AB): starkes Abschrecken Domänenausdehnung  $R_D \sim t^{1/3}$  für Dim  $d \geq 2$

Spin-Austausch langsam (viel Buchhaltung oder Nachbarsuche)

Leerstelle als Katalysator: Leerstelle *wandert* durch System. *vacancy-mediated dynamics*

Abhängigkeit des Domänenwachstums:

$$R_D \sim \frac{2}{2 + \frac{\langle E \rangle}{N}} \quad (1)$$

Cluster von  $N_D$   $\uparrow$ -Spins im  $\downarrow$ -Spin-See

$$E \approx -2N_D + 2R_D$$

$R_D$ : Rand

$$\Rightarrow E/N_D \approx -2 + 2R_D/N_D$$

letzter Summand:  $\mathcal{O}(R_D^2) \Rightarrow (1)$

## 15.6 Ising-ähnliche Modelle

### 15.6.1 x-y-Modell

- Quadratgitter
- $\vec{s}_i$  in Ebene, normiert
- $E = -J \sum_{i,j}^{n.N.} \vec{s}_i \vec{s}_j$   
 $= -J \sum_{i,j}^{n.N.} \cos(\Theta_j - \Theta_i)$
- $\langle M \rangle = 0 \forall T$
- $C(r) \sim r^{-\alpha}$  für  $T < T_{KT}$
- $C(r) \sim e^{-r}$  für  $T > T_{KT}$

KT - Kosterlitz-Thouless

unterhalb der KT-Temperatur  $T_{KT}$  haben wir eine Linie von kritischen Punkten

$\langle \Theta^2 \rangle$  in Abhängigkeit von  $N \sim \log N$

$\Theta$  - Winkel zwischen  $\vec{s}_i$  und  $\vec{M}$

*Richtung ist nicht so anschaulich. Also definiert man sich eine Vortizität Vorticity:*  
 $\frac{\text{Anzahl der Wirbel}}{L^2}$  in Abhängigkeit von T

Paare von  $\oplus$  und  $\ominus$  für  $T < T_{KT}$  freie Wirbel für  $T > T_{KT}$

4 Spins (n.N.) 4 Winkel (n.N.)  $\in [-\pi, \pi)$  der Nächstnachbarn zu einander

$\sum \angle \rightarrow 3$  mögliche Werte:  $2\pi \Leftrightarrow \oplus$   $0 \Leftrightarrow \ominus$

$$\text{KT-Theorie } \chi \sim e^{b/(\frac{T-T_{KT}}{T_{KT}})^\nu}$$

Nenner ist skaliert  $\Rightarrow$  reduzierte Temperatur

$\nu = 0.5$  für kleine Systeme  $\nu = 0.7$  empirisch

*Das heißt, es ist keine schöne Methode, um Simulationen nachzuvollziehen*

### 15.6.2 Heisenberg-Modell

Quadratgitter  $\vec{s}_i$  in 3 Dimensionen

$$E = -J \sum_{i,j}^{n.N.} \vec{s}_i \vec{s}_j$$

### 15.6.3 Ising-Spin-Glas

$$J_{i,j} \in \{-1, 1\} \text{ zufällig}$$

Frustrations-Effekte

### 15.6.4 Potts-Modell

$$E = -J \sum_{i,j}^{n.N.} \delta_{s_i, s_j}$$

$\delta$  - Kronecker-Delta

q Werte für  $s_i$  q = 2  $\Rightarrow$  Ising

## 15.7 Klassische Flüssigkeiten

$$E = E_{kin}(\{v_i\}) + E_{pot}(\{x_i\})$$

$v_i$  und  $x_i$  entkoppelt

statistische Mechanik:  $v_i$  tragen  $\frac{1}{2}k_B T$  pro FHG zu  $\langle E \rangle$  bei  
radiale Paarverteilungsfunktion  $g(r)$

$$\frac{E_{pot}}{N} = \frac{\rho}{2} \int g(r) u(r) dr$$

$\rho$  - Dichte

$u(r)$  - Paarwechselwirkung

Zustandsgleichung (bekannt als Beziehung zwischen Druck und Volumen)

$$\beta \frac{P}{\rho} = 1 - \frac{\beta \rho}{2d} \int g(r) r \frac{du}{dr} dr$$

### 15.7.1 Harte Kugeln

Historisch erste Anwendung des Metropolis-Algorithmus'

$$u(r) = \infty \text{ für } r < \sigma$$

$$0 \text{ für } r \geq \sigma$$

$$\langle E_{pot} \rangle = 0$$

$\infty$  taucht nicht auf, da sich die Kugeln nicht überlappen können

$$\frac{\beta P}{\rho} = 1 + \frac{2\pi}{3} \rho \sigma^3 g(\sigma) \text{ für } d = 3$$

$$= 1 + \frac{\pi}{2} \rho \sigma^2 g(\sigma) \text{ für } d = 2$$

$$= 1 + \rho \sigma g(\sigma)$$

Monte-Carlo:

- wähle Kugel i zufällig

- wähle  $\Delta_x \in [-\delta, \delta]$
- wähle  $\Delta_y \in [-\delta, \delta]$
- wähle  $\Delta_z \in [-\delta, \delta]$
- wenn Überlapp mit anderer Kugel: abgelehnt
- sonst: akzeptiert

numerisch sinnvoll: kleine Zellen zur einfacheren Auswertung  
bestimme  $g(r)$

P aus  $g(r)$  für  $r \rightarrow \sigma$  ( $g(r)$  durch Parabel anpassen)

### 15.7.2 Lenard-Jones-Potential

d = 2 Dimensionen TVN fest: Boltzmann-Verteilung Metropolis:

- wie oben laufen lassen
- akzeptieren/ablehnen nach Metropolis

Widom insertion method

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}|_{V,T} = -k_B T \log Z_{N+1}/Z_N$$

$$Z_{N+1}/Z_N = \langle e^{-\beta \Delta E} \rangle$$

→ Mittelung über alle Zustände eines zusätzlichen Teilchens während Metropolis-Algorithmus  
nicht tatsächlich hinzugefügt  $\Rightarrow$  *excess chemical potential*

z.B. Edelgas-Cluster

- wähle Verschiebung des i-ten Teilchens für Metropolis-Algorithmus
- *magische* Zahlen N
- *simuliertes Tempern*
- Schmelzen

## 15.8 Datenanalyse am Phasenübergang

### 15.8.1 Histogramm-Methode

E in Abhängigkeit von  $p_{00} = \frac{1}{k_B T_0}$

$\Rightarrow$  Histogramm  $H_0(E) \leftarrow$  Anzahl der Konfigurationen  $= n(E)e^{-\beta E}$

$$\Rightarrow P(E, \beta_0) = \frac{H_0(E)}{\sum_E H_0(E)}$$

$$\text{Zustandsdichten}(E) \sim H_0(E)e^{\beta_0 E}$$

Anzahl der Mikrozustände hängt nicht von T ab

$$\text{allgemein: } P(E, \beta) = \frac{n(E)e^{-\beta E}}{\sum_E n(E)e^{-\beta E}}$$

$$P(E, \beta) = \frac{H_0(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_E H_0(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}}$$

$$\langle A(\beta) \rangle = \sum_{E,M} A(E, M)P(E, M, \beta)$$

mit  $H_0(E, M)$  in Abhängigkeit von  $\beta_0$  gut für  $\beta \approx \beta_0$

### 15.8.2 Lee & Kasterlitz-Methode

$$F(E) \equiv -k_B T \log \left( \log(E) e^{-\beta E} \right)$$

(Fehler in der Gleichung?)

Phasenübergang 1. Ordnung hat zwei Minima von F bei  $E_+$  und  $E_-$   
 $E_-$  - absolutes Minimum

T niedrig: E niedrig wichtig für  $Z \Rightarrow F(E_-) < F(E_+)$

T hoch: hohe E wichtig für  $Z \Rightarrow F(E_-) > F(E_+)$

am Phasenübergang:  $F(E_-) \approx F(E_+)$

Lee & Kasterlitz:

$$\text{Peak in } c_v \Rightarrow \beta_0 \Rightarrow H_0(E)$$

$$F(E) \sim -\log H_0(E) + (\beta - \beta_0)E$$

suche die 2 Minima, s.d.  $F(E_-) = F(E_+) \Rightarrow \beta_c$

$$\text{allgemein: } F(M) \sim -\log \sum_E H_0(E, M)e^{-(\beta-\beta_0)E}$$

magnetfeldgetriebener Phasenübergang

### 15.8.3 Binder-Kumulante

$$U_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2}$$

$$U_{L,min} = 2/3 - 1/3 \left( \frac{E_+^2 - E_-^2}{2E_+ E_-} \right)^2 + \mathcal{O}(L^{-d})$$

Annahme: P(E) Gaußverteilung um  $E_-$  und  $E_+$  wird mit wachsendem L schärfer  
 für stetigen Phasenübergang  $U_{L,min} = 2/3$

zum Beispiel Ising-Modell

$$V_L \equiv 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}$$

Annahme:  $P(E)$  Gaußverteilung um  $E = 0$

## 15.9 Kombinatorische Optimierung

Handlungsreisender (Traveling Salesman)  $N$  Städte, geschlossener Weg, jede Stadt einmal besucht exakte Lösung: NP-vollständig

nichtdeterministisch  $\Rightarrow$  polynomial (auf Quantencomputern)

Energie  $\hat{=}$  Kostenfunktion  $\hat{=}$  Weglänge

Anmerkung Anna:  $\Delta E$

- abzählen

- heuristisch ins lokale Minimum

- simuliertes Tempern:

neuen Weg mit Wahrscheinlichkeit  $W = \min(1, e^{-\beta \Delta E})$  akzeptiert

fiktive  $T = \frac{1}{k_B \beta}$  absenken

zum Beispiel:

- zwei Städte vertauschen
- zwei Wegstreckenteile vertauschen

Anmerkung Anna: more class

## 16 Quantensysteme

Ort und Impuls nicht gleichzeitig messbar

Wahrscheinlichkeitsamplitude

Wellenfunktion  $\Psi(x, t) \in \mathbb{C}$

Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\Psi|^2$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

oft  $\hbar \equiv m \equiv 1$

Observable A beschrieben durch  $\hat{A}$

Messung: Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dx$$

Ort:  $\hat{x} = x$

Impuls  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

kinetische Energie  $\hat{E}_{kin} = \hat{p}^2/2m$

Masse  $\hat{m} = m$

### 16.1 zeitunabhängige Lösung

(V zeitunabhängig)

$$Ansatz : \Psi(x, t) = \phi(x) e^{-iE \frac{t}{\hbar}}$$

(komplexe Darstellung einer Welle)

zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + V\phi = E\phi$$



Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

Eigengleichung  $\hat{H}\phi = E\phi$

Eigenwert E: Energie

Lösungen  $\phi_n, E_n$

Niedrigste Energie: Grundzustand Höhere Energien: angeregte Zustände

$$\text{allgemein: } \Psi = \sum_n c_n \phi_n e^{-iE_n \frac{t}{\hbar}}$$

Eine solche Linearkombination bezeichnet man auch als Wellenpaket

Orthogonalität der Eigenfunktionen ist gegeben

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, t=0) dx$$

entspricht der Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass die Messung den Wert  $E_n$  ergibt.

Projektion von  $\Psi$  auf  $\phi_n$

OSP:

SchroedingerApp

ComplexPlotFrameApp

Complex2DFrameApp

Anmerkung:

endlich tiefer Potentialtopf

typischerweise gebundene Zustände mit Energie *innerhalb* des Topfes (räumlich fixierte gebundene Teilchen)

*über* dem Topf: freie Zustände (wandern drüber hinweg)

unendlicher Topf:

ausschließlich gebundene Zustände

EigenStateApp

BoxEigenState

getEigenstate

BoxSuperpositionApp

Eigenwerte der Energien in unendlichem Potentialtopf:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \quad (1\text{-indiziert})$$

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(n\pi x) \quad n = 1, 3, 5, \dots \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(n\pi x) \quad n = 2, 4, 6, \dots \end{aligned}$$

Numerische Darstellung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x) = -(E - V(x))\Phi(x) \frac{2m}{\hbar^2}$$

$$d\Phi/dx = \Phi'$$

$$d\Phi'/dx = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\Phi$$

$$dx/dx = 1$$

AB:

$$\Phi(0) = 0$$

$$\Phi'(0) = 1$$

ortsdiskrete Auflösung

Anschließend wird das Gleichungssystem im Ort (per RK45) gelöst und die Anschlussbedingung auf der rechten Seite geprüft. Danach wird beispielsweise per Metropolis oder wie bei Phillip manuell iteriert.

Bezug zum Übungsblatt: Potentialstufe mit Höhe  $V_0$

analytische Lösung

$$\phi = e^{-ikx} = e^{\frac{-i2\pi x}{\lambda}}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V_0$$

k - Wellenvektor  $\lambda$  - Wellenlänge

$$\phi = e^{\kappa x} \text{ exponentieller Anstieg}$$

$$\phi = e^{-\kappa x} \text{ exponentieller Abfall}$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2$$

$\kappa$  - Eindringtiefe

Anstieg ist unphysikalisch, Abfall ist schon realistischer

Bei Unklarheiten siehe Quantenmechanik-Hefter

Bei ausreichender Energie ( $> V_0$ ) wird die Wellenlänge schlicht reduziert Ansonsten dringt das Teilchen in die Wand ein und wird reflektiert Höhere Stufe  $\Leftrightarrow$  geringere Eindringtiefe

Zur Übung (7c mit  $a=5$ ,  $V_0 = 1$ ): Stufe in rechter Hälfte  $E_2 = 0.1505$   $E_3 = 0.5857$   $E_4 = 1.1195$

$E = 0.15$  zwei Knoten  $E = 0.16$  drei Knoten  $\Rightarrow$  suche binär, so dass  $\phi(+a) = 0$   
 $\phi_{gerade}(a) > 0 \Rightarrow E$  zu klein  $\phi_{gerade}(a) < 0 \Rightarrow E$  zu groß  $\phi_{ungerade}(a) > 0 \Rightarrow E$  zu groß  
 $\phi_{ungerade}(a) < 0 \Rightarrow E$  zu klein  
*Stufe in der Mitte* symmetrisch:  $V(x) = V(-x)$

$$geradeParität \phi(x) = \phi(-x), \phi(0) = 1, \phi'(0) = 0$$

$$ungeradeParität \phi(x) = -\phi(-x), \phi(0) = 0, \phi'(0) = -1$$

*parabelförmiges Potential*

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2$$

Energien sind äquidistant

$\phi_0$  Gaußfunktion

$\phi_n$  Gaußfunktion \* Hermite-Polynom

$E_0 > 0$  Grundzustand, Nullpunktsschwingung

Auch hier wieder ein Eindringen in die Parabel

*lineares Potential*

$$V(x) = |x|$$

Beschreibung von Quarkonium (gebundene Quark-Antiquark-Systeme)

Begriff: Revival

*endlich tiefer Potentialtopf*

analytische Lösungen von vorhin (stufe/unendlich?) gelten auch hier

*Potentialberg*

Wellenlösungen, aber keine gebundenen Zustände

interessant: Tunnelung durch den Berg und Aufenthaltswahrscheinlichkeit darin

Welle - exponentielles Abklingen - Welle

$C_{60}$ -Moleküle sind bereits komplett getunnelt

## 16.2 Zeitabhängige Schrödingergleichung

$$\text{Diffusionsgleichung } \frac{\partial}{\partial t} P = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

$$t_n = t_0 + n\Delta_t$$

$$x_s = x_0 + s\Delta_x$$

naheliegend: *explizite Methode*

$$= D/\Delta_x^2 [P(x_{s+1}, t_n) - 2P(x_s, t_n) + P(x_{s-1}, t_n)]$$

Problem: numerisch instabil und Ableitungen divergieren von tatsächlicher Lösung

*implizite Methode*

$$= D/\Delta_x^2 [P(x_{s+1}, t_{n+1}) - 2P(x_s, t_{n+1}) + P(x_{s-1}, t_{n+1})]$$

$\Rightarrow$ lineares Gleichungssystem  $\Rightarrow$ höherer Aufwand, aber dafür stabil  
 TDHalfStepApp  
 Visscher et al.

$$R = \operatorname{Re}\Psi$$

$$I = \operatorname{Im}\Psi$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \hat{H}I$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} = -\hat{H}R$$

$$R(x, t + \Delta_t) = R(x, t) + \hat{H}I(x, t + \Delta_t/2)\Delta_t$$

$$I(x, t + 3/2\Delta_t) = I(x, t + \Delta_t/2) + \hat{H}R(x, t + \Delta_t)\Delta_t$$

anfangs:

$$R(x, 0)$$

$$I(x, \Delta_t/2) = I(x, 0) - \hat{H}R(x, 0)\Delta_t/2$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = R(x, t)^2 + I(x, t + \Delta_t/2)I(x, t - \Delta_t/2)$$

Gaußsches Wellenpaket

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi w^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4w^2}} e^{-ik_0(x-x_0)}$$

w - Breite

$$p_0 = \hbar k_0 \text{ Impuls}$$

$k_0$  Wellenvektor

$$\langle v \rangle = \hbar \frac{k_0}{m} = \frac{p_0}{m}$$

Wellenpakete laufen breit (hängt ausschließlich von Zeit ab, linear)

Schmale Pakete laufen schneller breit

Breite Pakete laufen langsamer

Anschlussbedingungen:

$\phi$  ist stetig

Ableitungen sind an der Anschlussstelle gleich

$$k_p = i\sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$$

$\Rightarrow$ Potential hat Einfluss auf Welleneigenschaften

## 16.3 Impulsraum-Darstellung

$\Phi(p, t)$  Wahrscheinlichkeitsamplitude

$|\Phi(p, t)|$  Wahrscheinlichkeit

$$\Phi(p, t) = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx$$

$$\Psi(x, t) = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{+i\frac{pt}{\hbar}} dp$$

$$\text{Gitter } \Phi(p_m) = \Phi_m = 1/\sqrt{N} \sum_{-N/2}^{N/2} \Psi_n e^{-i\frac{p_m x_n}{\hbar}}$$

$$\Psi(x_n) = \Psi_n = 1/\sqrt{N} \sum_{-N/2}^{N/2} \Phi_m e^{+i\frac{p_m x_n}{\hbar}}$$

FFTApp toNaturalOrder

z.B.  $\Psi_n = e^{in\Delta x} \Rightarrow$  eine Fourierkomponente

d.h. definierter Impuls

$$\text{Wellenlänge } \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}$$

deBroglie

$$p = \hbar k$$

Gitter mit N Stützstellen auf Länge L

$$\Rightarrow \min(\lambda) \leftrightarrow \max(p)$$

$$\max(\lambda) = L = N\Delta x \leftrightarrow \text{min. Impuls}$$

$$p_0 = h/L$$

$$\Delta_p = p_0, \max(p) = N\Delta_p$$

Heisenberg'sche Unschärferelation

$$\Delta_x \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}\frac{t-t_0}{\hbar}}$$

$$\Psi(x, t) = \hat{U} \Psi(x, t_0)$$

$$\text{Problem: } \hat{U} = e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\hat{V} \frac{\Delta t}{\hbar}}$$

nur für  $\Delta t \ll 1$ , weil  $[\hat{T}, \hat{V}] \neq 0$

$$\hat{T}\hat{V} \neq \hat{V}\hat{T}$$

$$\text{besser: } \hat{U} = e^{-i\hat{V}\Delta t/2\hbar} e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\hat{V}\Delta t/2\hbar} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

im Ortsraum  $\hat{V} = V$  multiplikativ  $\Rightarrow e^{-iV\Delta t/2\hbar}$  multiplikativ

im Impulsraum  $\hat{T} = T$  multiplikativ  $\Rightarrow e^{-iT \frac{\Delta t}{\hbar}}$  multiplikativ

$$T = p^2/2m$$

$\hat{p} = p$  im Impulsraum

Split-Operator-Algorithmus

$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{-V\Delta t/2\hbar} F^{-1} \left[ e^{-ip^2\Delta t/2m\hbar} F \left[ e^{-iV(x)\Delta t/2\hbar} \Psi(x, t) \right] \right]$$

F - FFT  $F^{-1}$  - inverse FFT

## 16.4 Variationsrechnung

$$\langle \hat{H} \rangle = E[\Psi] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{H} \Psi(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx} \geq E_0$$

$E[\Psi]$  - Energiefunktional  $E_0$  - Grundzustand

für gebundene Zustände genügt  $\Psi(x)$  reell

Variiere  $\Psi$ , so dass  $E[\Psi] \rightarrow E_0$

Naheliegend: Monte-Carlo mit Importance Sampling

$$E[\Psi] = \frac{\int \Psi^2 E_L(x) dx}{\int \Psi^2 dx} \text{ mit } E_L(x) = \frac{\hat{H} \Psi}{\Psi}$$

Importance Sampling: Wir wählen die Stützstellen geschickt, um Nullstellen zu vermeiden. Dazu nehmen wir folgenden Teil der Gleichung als Gewicht:

$$\frac{\Psi^2}{\int \Psi^2 dx}$$

- Wahrscheinlichkeitsdichte als Gewicht für Importance Sampling

$$E[\Psi] \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E_L(x_i)$$

$x_i$  - Stützstellen

Beispiel: harmonischer Oszillator

$$V = x^2/2$$

$$\Psi \sim e^{-\lambda x^2}$$

$$\lambda \approx \frac{1}{2}$$

$\Rightarrow$  Minimum der Energie bei  $\lambda = \frac{1}{2}$

$$\Psi^2 \sim e^{-2\lambda x^2}$$

Metropolis

wähle  $\delta_n \in [-\delta, \delta]$

$$x = x_n + \delta_n$$

$$w = \frac{e^{-2\lambda x^2}}{e^{-2\lambda x_n^2}}$$

$\geq 1$ : x akzeptiert, d.h.  $x_{n+1} = x_n + \delta_n$   
 $< 1$ : x akzeptiert mit Wahrscheinlichkeit  $w$   
 Auch hier: Einschwingverhalten abwarten (Gleichgewicht), bevor Messungen beginnen  
 nach Einschwingen:  $E_L$  messen

$$\sigma_L^2 = \langle E_L^2 \rangle - \langle E_L \rangle^2$$

exaktes Minimum:  $\sigma_L^2 = 0$

$$\text{z.B. } V = \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{8}$$

$$V = \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{8}$$

wir berechnen nicht den Grundzustand, sondern den niedrigsten Zustand im Potentialtopf

$$V = -e^2/r$$

- Coulomb-Potential

$$V = -e^2 e^{-\alpha r}/r$$

- abgeschirmtes Coulomb

## 16.5 Lösung der Schrödingergleichung mit Zufallspfaden

$$\tau = i \frac{t}{\hbar}$$

$\hbar$ , um Vorfaktor los zu werden

$$\Psi = \Psi(x, \tau)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V \Psi$$

→ Diffusionsgleichung mit  $D = \frac{\hbar^2}{2m}$  (Lösung mit Zufallspfad)

*Ohne linken Summanden der rechten Seite*

Beschreibt Differentialgleichung für Zerfallsprozesse für  $V > 0$

beziehungsweise Wachstumsprozess für  $V < 0$

→ Anzahl Zerfallspfade nimmt ab/zu

$$\text{Anzahl } n_i \hat{=} \Psi(x, \tau) \Delta_x$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \Phi_n(x) e^{-E_n \tau} \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} c_0 \Phi(x) e^{-E_0 \tau}$$

d.h. Grundzustand

Problem: wenn  $E_0 > 0$ : Zerfall, d.h.  $n_i \rightarrow 0$

Lösung: Energieskala so wählen, dass  $\sum_i n_i = \text{const.}$

d.h. verschieben um  $V_0$

hier am besten,  $V_0 = E_0$  zu wählen (Grundzustandsenergie)

$n_i$  an  $c_0 \Phi_0 e^{-E_0 \tau}$  anpassen →  $E_0$

QMWalkApp für harmonischen Oszillator am Anfang  $N_0$  Zufallswanderer auf Plätze  $x_i$  setzen

$$V_0 = \frac{1}{N_0} \sum_i V_i$$

$$x \rightarrow x_1 \pm \Delta_s$$

$$\Delta_s^2 = 2D\Delta_\tau$$

$$D = \frac{1}{2} \text{ für } \hbar = m = 1$$

$$\Rightarrow \Delta_s^2 = \Delta_\tau$$

Wähle  $r \in [0, 1]$

$V(x) - V_0 = \Delta_V > 0$  und  $r < \Delta_V \Delta_\tau \Rightarrow$  Zufallswanderer fällt weg

$V(x) - V_0 = \Delta_V < 0$  und  $r < -\Delta_V \Delta_\tau \Rightarrow$  neuer Zufallswanderer bei  $x$



sonst keine Änderung

okay für  $\Delta_\tau \ll 1$

sonst besser  $w = e^{-\Delta V \Delta_\tau} - 1 = n + f$

n - Anzahl neuer Zufallswanderer

f - neuer Zufallswanderer mit Wahrscheinlichkeit f

iterieren für jedes i bzw.  $x_i$

$$E_0 = \langle V \rangle$$

$$V_0 = \langle V \rangle - \frac{a}{N_0 \Delta_\tau} (N - N_0)$$

N - Zahl der Zufallswanderer

Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Methode

Verallgemeinerung: Schrittlängen

gaußverteilt:  $e^{-(x-x')^2/4D}$

und exponentielle Anpassung der Anzahl der Zufallswanderer:  $e^{-V \Delta_\tau}$

$$\Psi(x, \tau) = \int G(x, x', \tau) \Psi(x, 0) dx'$$

G - Propagator, Green'sche Funktion

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} = -(\hat{H} - V_0)G$$

$$\text{Lösung: } G(\tau) = e^{-(\hat{H} - V_0)\tau}$$

$$\text{für } \Delta_\tau \ll 1 : G(\Delta_\tau) \approx G_Z G_D$$

$$\text{Zerfall/Wachstum: } G_Z \equiv e^{-(\hat{V} - V_0)\Delta_\tau}$$

$$\text{Diffusion: } G_D \equiv e^{-\hat{T}\Delta_\tau}$$

$$\frac{\partial G_D}{\partial \tau} = -\hat{T}G_D = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 G_D}{\partial \tau^2}$$

$$\frac{\partial G_Z}{\partial \tau} = (V_0 - \hat{V})G_Z$$

$$G_D(x, x', \Delta_\tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D \Delta_\tau}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4D}}$$

$$G_Z(x, x', \Delta_\tau) = e^{-\left(\frac{V(x)+V(x')}{2} - V_0\right)\Delta_\tau}$$

$$D = \frac{\hbar^2}{2m}$$

$V_0$  dient im Prinzip dazu, die Anzahl konstant zu halten

Für mehr Infos, siehe Buch

## 16.6 Pfadintegrale mit Quanten-Monte-Carlo-Methode

Prinzip der kleinsten Wirkung

$$S = \int_{x_0,0}^{x,t} \mathcal{L} dt \text{ minimal für klassischen Pfad}$$

$\mathcal{L}$ (geschwungenes L) - Lagrangian, Lagrange-Operator

$$\text{klassisch: } \mathcal{L} = E_{kin} - E_{pot}$$

$$\text{Feynman: } \hat{\mathcal{L}} = \hat{T} - \hat{V}$$

$$G(x, x_0, t) = A \sum_{\text{Pfade}} e^{i\frac{S}{\hbar}} \text{ erfüllt}$$

t - reelle Zeit

A - unwichtige Normierung

Summe - Summe über alle möglichen Wege von  $(x_0, 0)$  nach  $(x, t)$

Exponentialfaktor - führt zu Interferenzeffekten

S - Gewicht, mit dem die einzelnen Pfade in die Summe eingehen

$$G(x, x_0, t) = \sum_n \Phi_n(x) \Phi_n(x_0) e^{-iE_n t}$$

$$\tau = it \Rightarrow G(x, x_0, \tau) = \sum_n \Phi_n(x) \Phi_n(x_0) e^{-\tau E_n}$$

$\tau \rightarrow \infty \Rightarrow$  Grundzustand  $G(x, x, \tau)$  - geschlossene Pfade  $\rightarrow \Phi_0^2(x) e^{-\tau E_0}$

z.B. 1 Teilchen

$$L(x_j, \tau_j) = -\frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j)^2 / \Delta_\tau^2 - V(x_j)$$

$$\tau_j = j \Delta_\tau$$

$$x_j = x(\tau_j)$$

$$S = -i \Delta_\tau \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j) / \delta_\tau^2 + V(x_j) \right]$$

$\rightarrow$

$$e^{iS} = e^{\Delta_\tau \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j) / \delta_\tau^2 + V(x_j) \right]}$$

$$G(x, x_0, N \Delta_\tau) = A \int dx_1 \dots dx_{N-1} e^{\Delta_\tau \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j) / \delta_\tau^2 + V(x_j) \right]}$$

Integral über alle Pfade  $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}, x_N$   
für Grundzustand:  $x = x_0 = x_N(pbc)$

## 17 Bewegung starrer Körper

### 17.1 Koordinatentransformationen in 2 Dimensionen

Rotation

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Streckung

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_x & 0 \\ 0 & s_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Translation

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_x \\ d_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

homogene Koordinaten: Punkt:  $(x, y, w)$ , in der Regel  $w = 1$ ; für Perspektive  $w \neq 1$   
Vektoren:  $(x, y, 0)$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{00} & m_{01} & m_{02} \\ m_{10} & m_{11} & m_{12} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix}$$

Translation:

$$\begin{aligned} \vec{M} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & d_x \\ 0 & 1 & d_y \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \vec{M} &= \begin{pmatrix} \vec{A} & \vec{d} \\ \vec{0}^T & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

AffineTransform Affine2DApp

### 17.2 Koordinatentransformation in 3 Dimensionen

Rotation um z-Achse

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \vec{R}_z \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{R}_\theta & \vec{0} \\ \vec{0}^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

entsprechend  $\vec{R}_x, \vec{R}_y$

Rotation3D

Rodrigues-Formel

$$\hat{R}_r \vec{v} = (1 - \cos(\theta))(\vec{v}\hat{r})\hat{r} + \sin(\theta)(\hat{r} \times \vec{v}) + \cos(\theta)(\vec{v})$$

letzter Term: eigentlich  $\vec{v} - (\vec{v}\hat{r})\hat{r}$ , aber das ist schon im ersten Term drin (eigentlich 1, hier aber  $1 - \cos(\theta)$ )

Term 1:  $\vec{v}_{\parallel}$  Term 3:  $\vec{v}_{\perp}$  Term 2: orthogonal zu beiden  
homogene Koordinaten

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{00} & m_{01} & m_{02} & m_{03} \\ m_{10} & m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{20} & m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R}_r & \vec{d} \\ \vec{0}^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$$

Projektion hier: orthographisch-parallele Projektion auf Ebene senkrecht zu Koordinatenachse

$$P \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

(einfach und langweilig)

OSP: Transformation interface Affine3DMatrix

## 17.3 Java APIs für Visualisierung in 3 Dimensionen

Bibliotheken:

- gl4java
- jogl

OSP:

- display3D
- simple3D

Beispiele:

- Box3DApp
- Display3DFrame
  - getStyle
  - setDecorationType
  - addElement
    - \* ElementBox

- \* ElementCylinder
- \* ElementCircle
- Interaction3DApp
- Group
- BarBell3D
- BarBell3DApp
- Methane

## 17.4 Dynamik eines starren Körpers im Laborsystem $\mathcal{L}$

$\mathcal{L}$ - Inertialsystem, Laborsystem, space frame

$$d\vec{p}/dt = \vec{F}$$

$$d\vec{L}/dt = \vec{N}$$

$\vec{N}$  - Drehmoment um 0 (meist Schwerpunkt / Auflagepunkt)

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

$$\vec{L} = \overset{\leftrightarrow}{I} \vec{\omega}$$

$\overset{\leftrightarrow}{I}$  - Trägheitsmoment, zu berechnen aus Masseverteilung (bequemer in  $\mathcal{K}$ )

$\mathcal{K}$ - körpereigenes System, body frame

in  $\mathcal{K}$ : Hauptträgheitsachsen so, dass

$$\overset{\leftrightarrow}{I} = \begin{pmatrix} I_1 & 0 & 0 \\ 0 & I_2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3 \end{pmatrix}$$

$$I_1 = \int_V \rho(\vec{r})(y^2 + z^2) dV$$

$$I_2 = \int_V \rho(\vec{r})(x^2 + z^2) dV$$

$$I_3 = \int_V \rho(\vec{r})(x^2 + y^2) dV$$

$$d\vec{L}/dt|_{\mathcal{L}} = d\vec{L}/dt|_{\mathcal{K}} + \vec{\omega} \times \vec{L}$$

das heißt in  $\mathcal{K}$ :

$$d\vec{L}/dt + \vec{\omega} \times (\overset{\leftrightarrow}{I} \vec{\omega}) = \vec{N}$$

Euler'sche Gleichungen

$$I_1 \dot{\omega}_1 + (I_3 - I_2) \omega_3 \omega_2 = N_1$$

$$I_2 \dot{\omega}_2 + (I_1 - I_3) \omega_1 \omega_3 = N_2$$

$$I_3 \dot{\omega}_3 + (I_2 - I_1) \omega_2 \omega_1 = N_3$$

TorqueApp *Unwucht bei Autoreifen* toBodyFrame toSpaceFrame

Eulerwinkel  $\Psi, \Theta, \Phi$  drei Rotationen um 3 vorgegebene Achsen in  $\mathcal{K}$

Ratengleichungen in  $\mathcal{K}$

$$\begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\Theta) \sin(\Psi) & \cos(\Psi) & 0 \\ \sin(\Theta) \cos(\Psi) & -\sin(\Psi) & 0 \\ \cos(\Theta) & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\Phi} \\ \dot{\Theta} \\ \dot{\Psi} \end{pmatrix}$$

Problem: Singulär für  $\sin(\Theta) = 0 \Rightarrow$  instabil für  $\Theta \approx 0$  und  $\Theta \approx \pi$

$$\overset{\leftrightarrow}{R}(\Psi, \Theta, \Phi) = \overset{\leftrightarrow}{R}_z(\Psi) \overset{\leftrightarrow}{R}_x(\Theta) \overset{\leftrightarrow}{R}_z(\Phi)$$

z, x, z ist kein Fehler, sondern gewollt

## 17.5 Quaternionen

komplexe Zahlen  $\vec{a} = a_x \vec{x} + a_y \vec{y}$

$$a = a_x + i a_y$$

Rotation um  $\theta$ :

$$a' = a e^{i\theta} = e^{i\theta/2} a e^{i\theta/2}$$

$$e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$$

hyperkomplexe Einheiten i, j, k

$$q = q_0 + i q_1 + j q_2 + k q_3 = (q_0, q_1, q_2, q_3) = (q_0, \vec{q})$$

$$q^* = (q_0, -\vec{q}) \text{ Q-konjugiert}$$

$q_0 = 0 \Rightarrow$  reine Quaternionen

Hamiltonsche Regeln:  $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$

analog zyklische Vertauschung

$$ij = k \quad ji = -k \quad jk = i \quad kj = -i \quad ki = j \quad ik = -j$$

(\*)

$$pq = q_0 p_0 + \vec{q} \vec{p} + q_0 \vec{p} + p_0 \vec{q} + \vec{p} \times \vec{q}$$

$$\|q\|^2 = qq^* = q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2$$

Euler: Rotation um  $\theta$  bezüglich Achse (u1, u2, u3) (Richtungskosinus)

dargestellt durch

$$q = \cos(\theta/2) + (iu_1 + ju_2 + ku_3)\sin(\theta/2)$$

$$= e^{\vec{u}\theta_2}$$

$\overset{\leftrightarrow}{R}$  - Rotationsmatrix

$$\vec{a}' = \overset{\leftrightarrow}{R} \vec{a}$$

$$a = (0, \vec{a})$$

$$a' = (0, \vec{a}') = qaq^*$$

$$\|a\| = \|a'\|$$

QuaternionApp BoxWithArrows

Anhang A17.B: Transformationen  $Q \overset{\leftrightarrow}{R} q \leftrightarrow \Psi, \Theta, \Phi$   
Beispiel:

$$q_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\Phi + \Psi}{2}\right)$$

$$q_1 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\Phi - \Psi}{2}\right)$$

$$q_2 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\Phi - \Psi}{2}\right)$$

$$q_3 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\Phi + \Psi}{2}\right)$$

$$q_0 = \frac{\sqrt{1 + r_{00} + r_{11} + r_{22}}}{2}$$

$$q_1 = \frac{r_{12} - r_{21}}{4q_0}$$

$$q_2 = \frac{r_{20} - r_{02}}{4q_0}$$

$$q_3 = \frac{r_{01} - r_{10}}{4q_0}$$



## 17.6 Bewegungsgleichungen

Rotation durch  $q$  mit  $qq^* = 1$  dargestellt

Winkelgeschwindigkeit in  $\mathcal{K}$ :  $\dot{q} = \frac{1}{2}\omega(t)q(t)$  mit

$$\omega = (0, \vec{\omega})$$

$$r(t) = q(t)r_0q^*(t) \text{ mit } r = (0, \vec{r})$$

$$\Leftrightarrow q^*rq = r_0 = q^*qr_0q^*q$$

$$\dot{r} = \dot{q}r_0q^* + qr_0\dot{q}^*$$

$$= \dot{q}q^*r + rqq^*$$

$$= \dot{q}q^*r - r\dot{q}q^* \text{ mit } qq^* = 1 \text{ und } \frac{d}{dt}qq^* = 0$$

$$\dot{q}q^* := (u_0, \vec{u}) = u$$

$u$  - Hilfsvariable

in  $u, r$  kommutieren alle Anteile außer  $\vec{u} \times \vec{r}$

Anmerkung Anna: Vergleich mit (\*)

$$\dot{\vec{r}} = \vec{u} \times \vec{r} - \vec{r} \times \vec{u} = 2(\vec{u} \times \vec{r})$$

$$\dot{\vec{r}} = \vec{\omega} \times \vec{r} \Rightarrow \vec{\omega} = 2\vec{u}$$

$$(0, \omega)^T = wW\dot{q}$$

$$\text{mit } W = \begin{pmatrix} q_0 & \vec{q} & & \\ & q_0 & q_3 & -q_2 \\ -\vec{q}^T & -q_3 & q_0 & q_1 \\ & q_2 & -q_1 & q_0 \end{pmatrix}$$

orthogonal, d.s.  $W^{-1} = W^T$

Achtung:  $(\vec{\omega}, 0)$  im Buch!

$$\dot{q} = \frac{1}{2}W^T(0, \vec{\omega})$$

*Halbschrittalgorithmus*

- in  $\mathcal{L}$ :  $\vec{L}(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \mathcal{L}(t - \frac{1}{2}\Delta t) + \vec{N}(t)\Delta t$
- Trafo nach  $\mathcal{K}$ , in  $\mathcal{K}$ :  $\vec{\omega} = \overset{\leftrightarrow}{J}^{-1} \vec{L}$

N - Drehmoment  
 L - Drehimpuls  
 J - Trägheitsmoment  
 $\Rightarrow$

$$q(t + \Delta_t) = q(t) + \dot{q}(t + \frac{1}{2}\Delta_t)\Delta_t$$

FeynmanPlate  
 FeynmanPlateView in  $\mathcal{L}$   
 ElementCylinder  
 ElementArrow  
 ElementTrail

Anmerkung Anna:  $\omega$  doppelt so schnell wie Trail  
 höhere Genauigkeit mit  $\ddot{q}$

$$\frac{d}{dt}q^*\dot{q} = \dot{q}^* \text{dot} q + q^*\ddot{q}$$

$$\ddot{q} = q(\frac{d}{dt}q^*\dot{q} - \dot{q}^*\dot{q}) = \dots$$

$$= \frac{1}{2}W^T \left( \begin{array}{c} -2 \sum \dot{q}_m^2 \\ \dot{\omega} \end{array} \right)$$

Reihenfolge des Vektors und der Matrix ist vertauscht (Realteil und rein hyperkomplexer Anteil) (Siehe Anmerkung von Anna)

Rigid Body löst Eulersche Gleichungen

$$\dot{q} \rightarrow \vec{\omega}; \vec{N} \rightarrow \mathcal{K} : Euler \rightarrow \dot{\omega} \rightarrow \ddot{q}$$

RigidBodyUtil für  $\|\cdot\|$  (Norm), Transformationen

- spaceToBody
- bodyToSpace

FreeBodyApp

- Kein Auflagepunkt, System rotiert um Schwerpunkt

FreeRotationView

FreeRotationSpaceView

## 17.7 Kreisel

$\vec{N}_{ext}$  bzgl. Auflagepunkt  $\Rightarrow$  Kraft in (0, 0, 1)-Richtung  
 SpinningTop

- symmetrischer Körper rotiert bzgl. Achse von  $I_3$
- Abstand Auflagepunkt-Schwerpunkt  $\equiv 1$

$$\vec{N}_{ext} = \vec{3} \times \vec{F}_K$$

SpinningTopSpaceView

Aliasing: Felgenmuster läuft scheinbar rückwärts  
für große  $\vec{\omega}$ , zwei Präzessionsraten

$$\dot{\Phi} \approx I_3/I_1 \omega_3 / \cos(\theta_0)$$

Anmerkung:  $I_1 = I_2$

$\theta_0$  - Winkel zwischen senkrechte Achse und  $\vec{3}$

$$\dot{\Phi} \approx mgl/I_3 \omega_3$$

l - Abstand Auflagepunkt-Schwerpunkt

# 18 Relativitätstheorie

## 18.1 spezielle Relativitätstheorie

S - Bezugssystem des Beobachters

S' - Ruhesystem des Objektes

Objekt bewegt sich mit

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} -v \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

bzgl. S

$$x' = \frac{1}{\gamma}(x - vt)$$

$$y' = y$$

$$z' = z$$

$$t' = \gamma(t - (\frac{vx}{c})^2)$$

$$x = x' \text{ für } t' = t = 0$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

$$\beta = \frac{v}{c}$$

$$d^2 = \Delta_x^2 + \Delta_y^2 + \Delta_z^2$$

$$d'^2 = \Delta_{x'}^2 + \Delta_{y'}^2 + \Delta_{z'}^2$$

$$\Delta_x = \gamma \Delta_{x'}$$

Contracted Ring

- Ring wird aus Drahtstücken zusammen gesetzt
- nur Knoten berechnen
- affine Transformation bzgl. Lorentz-Trafo  
→ Verzerrung  
⇒ Lorentz-Fitzgerald-Transformation

ObservedRing (Zeitverzögerung in Beobachtung)

- Retardierung

$$r_{ret} = \begin{pmatrix} x - \delta \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\delta = v\tau$$

$\tau$  - Zeit für  $r_{ret}$ (Weg)

$$|r_{ret}| = c\tau = \sqrt{(x - v\tau)^2 + y^2 + z^2}$$

Wenn sie das umformen, dann bekommen sie  $\tau = -x\beta$  auf dem Bruchstrich  $+\sqrt{x^2 + (y^2 + z^2)/\gamma^2}$  das war alles auf der Wurzel und das Ganze die Wurzel wird dividiert durch  $\frac{c}{\gamma^2}$ . Im Buch sieht das noch komplizierter aus, ich hab das vereinfacht. Moment. Der Bruchstrich umfasst auch das  $x\beta$ . Man könnte versuchen, das  $\gamma$  da hoch zu bringen, aber das bringt keine wesentliche Vereinfachung.

$$\tau = -\frac{x\beta + \sqrt{x^2 + y^2 + z^2/\gamma^2}}{c/\gamma^2}$$

Wenn sie sich das anschauen, wenn Herr Cain ihnen das vorführt, dann wird eben so ein Ring bewegt und wenn der Ring den Beobachter berühren sollte, dann gibt's einen scharfen Konvexpunkt, also da wo der dann konvergiert. Wenn der Beobachter durch den Ring durch fliegt, dann wird das Ganze konkav. Wenn sie keinen Ring nehmen, sondern eine gerade Strecke, sprich ein Lineal, und das entlang der X-Achse bewegen, dann wird keine Kontraktion sichtbar. Beim Quadrat - beim Ring eigentlich auch, nur da ist das nicht so schön deutlich - wenn sie das beim Quadrat durchführen ... dann können sie auch die Rückseite sehen. Das liegt daran, dass das Objekt sich so weit fortbewegt hat, dass das Licht von der Rückseite in das Auge des Beobachters fallen kann.

Begriff: Terrell-Rotation (Rückseite sichtbar)

Die Ereignisse sind durch einen Abstand im vierdimensionalen Raum getrennt. Dieser Abstand ist

$$\Delta_\sigma^2 = d^2 - c^2\Delta_t^2 = -\Delta_\tau^2$$

Besteht also aus raumartigem und zeitartigem Abstand

Auch bekannt als Minkowski-Metrik

Weltlinien sind Trajektorien in der Raumzeit (besagtem vierdimensionalen Raum)

Minkowski-Metrik ist für spezielle Relativitätstheorie relevant.

Ergibt sich aus Annahme: Maxwell-Gleichungen müssen für gleichförmig geradlinig bewegte Bezugssysteme nicht geändert werden (für jeden Betrachter)

## 18.2 Allgemeine Relativitätstheorie

gekrümmter Raum: Eddington 1919

Experimenteller Nachweis, dass es eine realistische Beschreibung der Natur ist (Während Sonnenfinsternis: Beobachtung von Sternen hinter der Sonne (schlechte Genauigkeit, musste 1922, 1953 und in den 1960ern wiederholt werden)

Gravitation  $\hat{=}$  Beschleunigung

Relativitätstheorie lässt sich ganz einfach mit 10 gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen beschreiben (Tensoranalysis und Riemannsche Geometrie notwendig. Fabian fragen.)

Prinzip des maximalen Alterns (Uhr in  $\mathcal{K}$ )  $\Rightarrow$  Pfad (Weltlinie)

Es gibt wenige exakte Lösungen, in der Regel für kugelsymmetrische Massen ansonsten nur Numerik

## 18.3 Dynamik in Polarkoordinaten

$$x = r \cos(\phi)$$

$$y = r \sin(\phi)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\phi = \tan^{-1}(y/x)$$

$$\dot{r} = \vec{r} \vec{v} / r$$

$$\dot{\phi} = L / m r^2$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$\frac{d}{dt} \Rightarrow$  Bewegungsgleichungen

$$\text{Lagrangian } \mathcal{L} = \frac{1}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + GM/r$$

Lagrange'sche Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0$$

$$\ddot{r} = r \dot{\phi}^2 - GM/r^2$$

$$\ddot{\phi} = -2/r \dot{\phi} \dot{r}$$

$$\text{Drehimpulserhaltung: } r \ddot{\phi} + 2 \dot{\phi} \dot{r} = 0$$

setPolar()

## 18.4 Schwarzschild-Koordinaten

schwere, kugelsymmetrische Masse  $M$   
 $g$  wie üblich

$$r = \frac{\text{Kreisumfang}}{2\pi}$$

$t$  gemessen aus großer Entfernung  $\neq$  Zeit auf Kreisbahn  $r$

$$\alpha = 1 - 2\frac{M}{r}$$

(Festlegung von Schreiber)  
*Schwarzschildmetrik*

$$\Delta_\sigma^2 = \frac{1}{\alpha}\Delta_r^2 + r^2\Delta_\phi^2 - \alpha\Delta_t^2 = -\Delta_\tau^2$$

erste beiden Terme: Eigenabstand (für  $\Delta_t = 0$ ) (die additiven Anteile) dritter Term:  
 (subtraktiver Anteil)

$$t[m] = ct[s]$$

$$M[m] = \frac{G^2}{c} M[kg]$$

$\Delta_t = 0$  und große  $r \Rightarrow$  Euklidische Metrik  $\Rightarrow$  Korrespondenzprinzip ist gewahrt

$$\Delta_\sigma^2 = \Delta_r^2 + r^2\Delta_\phi^2$$

$r_h = 2M$  : Ereignishorizont ( $\Delta_\sigma$  divergiert)

Ist schlicht ein Artefakt der Metrik Keine Divergenz für Längen um/im Objekt  
 $r_h$  ergibt schwarzes Loch, wenn  $M$  innerhalb von  $2Mr_h$

$$r_h(M_{Erde}) = 9mm$$

$$r_h(M_{Sonne}) = 2,952km$$

$$r_h(M_{\text{zentrales schwarzes Loch}}) = 7.600.000km$$

Eigenzeit ( $\Delta_r = \Delta_\phi = 0$ ) :  $\Delta_\tau^2 = \alpha\Delta_t^2$

z.B. Abstand von Lichtblitzen, Rotverschiebung

## 18.5 Trajektorien von Teilchen und Licht

Prinzip des maximalen Alterns (Eigenzeit, also Armbanduhr)

$$\mathcal{L} = \sqrt{\alpha - \dot{r}^2/\alpha - r^2\dot{\phi}^2}$$

Dieser Lagrangian erfüllt die Lagrange'schen Bewegungsgleichungen

$$\tau = \int_{\text{initialevent}}^{\text{finalevent}} d\tau = \int_{\text{initialevent}}^{\text{finalevent}} \mathcal{L} dt$$

Bewegungsgleichungen

$$\ddot{r} = \alpha r \dot{\phi}^2 + \frac{M}{r^2} \left( 3 \frac{\dot{r}^2}{\alpha} - \alpha \right)$$

$$\ddot{\phi} = 2 \frac{M - \alpha}{\alpha r^2} \dot{r} \dot{\phi}$$

$$\frac{d\tau}{dt} = \mathcal{L}$$

$$\text{Metrik} \Rightarrow \frac{d\tau}{dt} = \sqrt{\alpha - \frac{\dot{r}^2}{\alpha} - r^2 \dot{\phi}^2}$$

um Entwicklung von  $\tau$

Kreisbahnen mit  $v = \sqrt{\frac{M}{r}}$  für  $r \geq 6M = 3r_h$

Keine stabilen Kreisbahnen für  $r < 6M \Rightarrow$  keine stationären Beobachtungssatelliten

Licht:  $\Delta_\tau = 0$  entlang Weltlinie

$$0 = -\alpha \Delta_t^2 + 1/\alpha \Delta_r^2 + r^2 \Delta_\phi^2$$

$\Delta_t \rightarrow dt \Rightarrow$  Bewegungsgleichungen

$$\ddot{r} = 2M\alpha/r^2 + \dot{\phi}^2(\alpha r - 3M)$$

$$\ddot{\phi} = 2 \frac{M - \alpha}{\alpha r^2} \dot{r} \dot{\phi}$$

Damit Ablenkung von Licht durch schwere Masse beschreibbar  $\rightarrow$  sinnvoll für Gravitationslinsen Buch: Problem 18.12

$r=3, M=1$ : Kreisbahn

Andere Frage: Wohin muss man Kommunikationssignale schicken? Ähnliches Problem: Drei Beobachter wollen telefonieren  $\rightarrow$  in Ebene, Winkel addieren sich aber nicht zu 180 deg



## 18.6 Sehen $\neq$ Trajektorien in der Schwarzschildabbildung

Warum?  $\rightarrow$  Kontraktion in r-Richtung um  $\sqrt{\alpha}$  (weil  $1/\alpha$  im zweiten Term)

z.B. Beobachter auf Kugelschale

Abschußwinkel

$$\tan(\theta)_{Schale} = \sqrt{\alpha} \tan(\theta)_{Schwarzschild}$$

Parameter

$$b = r/\sqrt{\alpha} \sin(\theta_{Schale})$$

Licht mit  $b = \sqrt{27}M$  : "Bahn auf Messers Schneide"

instabil zwischen Divergenz und Sturz ins schwarze Loch

## 18.7 Dynamik

$$L/m = r^2 d\phi/d\tau$$

$$E/m = \alpha dt/d\tau$$

einsetzen in  $\Delta_\tau^2$

$$\Rightarrow (dr/d\tau)^2 = (E/m)^2 - \alpha [1 + (L/mr)^2]$$

Zweiter Term: effektives Potential  $(V(r)/m)^2$

Lustiges Diagramm mit  $x^3$ -x-Aussehen, aber asymptotisch gegen  $x=0$ , lokalem Maximum bei 6 und steigend gegen  $\infty$

## 18.8 Kerr-Metrik

rotierendes schwarzes Loch Drehimpulsparameter a

in Äquatorebene

$$\Delta_\tau^2 = \alpha \Delta_t^2 + 4Ma^2/r \Delta_t \Delta_\phi - 1/\alpha + a^2/r^2 \Delta_r^2 - (r^2 + a^2\alpha) \Delta_\phi^2$$

oder

$$\Delta_\tau^2 = \alpha \Delta_t^2 + 4Ma^2/r \Delta_t \Delta_\phi - 1/\alpha + a^2/r^2 \Delta_r^2 - (r^2 + a^2\alpha) \Delta_\phi^2$$

(vertippt)

Ereignishorizonte

$$r_h = M \pm \sqrt{M^2 - a^2}$$

maximaler Effekt, maximaler Drehimpuls  $a = M$

$\Rightarrow$  extremes Kerr-Loch

$$\Delta_\tau^2 = \alpha \Delta_t^2 + 4M^3/r \Delta_t \Delta_\phi - (1 - M/r)^{-2} - (r^2 M^2 + 2M^3/r) \Delta_\phi^2$$

$\Rightarrow$  Bewegungsgleichungen

Frame Dragging:

zwischen  $r_h = M$  und  $r_s = 2M$  wird Raum durch Rotation mit gezerrt. (Wie Honig)

Man (Raumschiff) würde tangential beschleunigt  
Für mehr siehe Buch

## 19 Ergänzungen

### 19.1 Kollektives Verhalten

GalaxyApp

statistische Mechanik (Perkolation) Schulman & Seiden

Self-Propagating Star Formation

p - Wahrscheinlichkeit, dass in Nachbarzelle ein Stern geboren wird

polares Gitter:

in erstem Ring (um Mittelkreis-Zelle): k Zellen Für Ring r: k Zellen mehr als bei Ring

$(r-1) = r \cdot k$  Zellen Nachbarschaft muss noch definiert werden, i.A. 6 Nächstnachbarn

Zellen sind verzerrt

Bei Rotation der Galaxis ist nicht Winkelgeschwindigkeit konstant, sondern  $v_\phi = \text{const}$

$\omega = v/r \approx 1/r$ , d.h. Ring um 1 Platz bewegen

aktive Zelle aktivieren nächste Nachbarn, werden selbst inaktiv

### 19.2 Eingeschränkte Dynamik

ConstraintApp

z.B. Fadenpendel statt in x-z-Ebene mit  $\theta$  beschreiben z.B. Zwei Teilchen auf einer Stange (statt Feder)

Holonome Beschränkung

Reduktion auf eine Dimension (entlang der Kurve)

Verallgemeinerte Koordinaten

Erfüllen implizit die holonome Beschränkung

Idee:  $\vec{q}$  statt  $\vec{r}$ , so dass  $\vec{r}(\vec{q})$  immer erlaubt

$$\dim(\vec{r}) = n$$

$$\dim(\vec{q}) = f$$

n - Raumdimensionen f - Freiheitsgrade n-f - Anzahl der holonomen Beschränkungen

Lagrangian (irgendwie anders als bei Relativitätstheorie)

$$\mathcal{L} = E_{kin} - E_{pot}$$

Details siehe Mechanikvorlesung

$$m_i \ddot{r}_i = F_i + Z$$

Z - Zwangskraft, durch die keine Arbeit geleistet wird (Senkrecht zu Weg)

$$\sum_i Z_i \dot{r}_i = 0, \text{ wenn } \dot{r}_i \text{ erlaubt ist}$$

$$\text{Jacobi-Matrix } J_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial q_j}$$

$$\text{Kettenregel: } \dot{r}_i = \sum_j J_{ij} \dot{q}_j$$

$$\Rightarrow \sum_{i,j} Z_i J_{ij} \dot{q}_j = 0$$

$$\text{deshalb } \sum_i Z_i J_{ij} = 0$$

$$\sum_i J_{ij} m_i \ddot{r}_i = \sum_i J_{ij} F_i + 0$$

Aus *Kettenregel*-Gleichung folgt:

$$\ddot{r}_i = \sum_k \dot{J}_{ik} \dot{q}_k + J_{ik} \ddot{q}_k$$

das ersetzt  $\ddot{r}_i$  in der Formel davor  $\Rightarrow$

$$J^T M J \ddot{q} = J^T F - J^T M \dot{J} \dot{q}$$

z.B. zwei Teilchen mit unterschiedlichen Massen  $m_1$  und  $m_2$   
Feder, Bahnkurve  $y = x^4 - 2x^2$

$$q_1 = x_1$$

$$q_2 = x_2$$

$$r_1 = x_1$$

$$r_2 = y_1$$

$$r_3 = x_2$$

$$r_4 = y_2$$

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ y_1' & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & y_2' \end{pmatrix}$$

$$y_1' = 4x_1^3 - 4x_1$$

$$y_2' = 4x_2^3 - 4x_2$$

$$M = \text{diag}(m_1, m_1, m_2, m_2)$$

$$J^T M J = \begin{pmatrix} m_1(1+y_1')^2 & 0 \\ 0 & m_2(1+y_2')^2 \end{pmatrix}$$

sehr einfach invertierbar  $\Rightarrow$  einfach nach  $\ddot{q}$  auflösbar

$$F_g = (0 - m_1 g \ 0 - m_2 g)^T$$

$$F_{Feder} = (x_2 - x_1 y_2 - y_1 x_1 - x_2 y_1 - y_2)^T k (1 - L_0/L)$$

$$L^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2$$

Das war's.