

Vorlesung:

# Computational Astrophysics

**WS 2000/2001**

an der Albertus-Magnus-Universität zu Köln

**Dr. habil. S. Pfalzner**

## Literatur

### Allgemein:

1. A.L. Garcia, Numerical Methods for Physics, Prentice Hall Inc., Upper Saddle River, New Jersey (1994)
2. W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling, B.P.Flannery, Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge (1992)

### Vielteilchensimulationen

1. M.P.Allen, D.J. Tidesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, Oxford (1987)
2. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, Cambridge (1995)
3. R.Haberlandt, S.Fritsche, G.Peinel, K. Heinzinger, Molekulardynamik, Vieweg, Braunschweig (1995)
4. S.Pfalzner, P.Gibbon, Many-body Tree Methods in Physics, Cambridge University Press, Cambridge (1996)

### Hydrodynamik

1. J. LeVeque Randall, Nonlinear Conservation Laws and Finite Volume Methods for Astrophysical Fluid Flow, SaasFee Course (1997)
2. R.L. Bowers, J.R. Wilson, Numerical Modeling in Applied Physics and Astrophysics, Jones and Bartlett Publishers (1991)
3. P.J. Roache, Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publ., Albuquerque (1982)
4. C. Laney, Computational Gas Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge (1998)
5. D. Mihalas, B. Wiebel Mihalas, Foundations of Radiation Hydrodynamics, Oxford University Press, Oxford (1984)
6. Landau Lifshitz, Hydrodynamik, Band 6, Akademie Verlag

**Auf dem Web:**

1. Collela, Puckett, Computational Fluid Dynamics  
[ftp:// barkley.berkeley.edu/e266/](ftp://barkley.berkeley.edu/e266/)
2. J.Leque  
[http:// www.amath.washington.edu/ rjl](http://www.amath.washington.edu/~rjl)

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung:</b>	<b>6</b>
1.1	Simulation astrophysikalischer Systeme: Warum, wozu und wie? . . .	6
1.2	Prinzipieller Aufbau der Simulation eines dynamischen Problems . . .	9
<b>2</b>	<b>Vielteilchensimulation</b>	<b>13</b>
2.1	Einleitung . . . . .	13
2.2	Grundgedanke der Vielteilchensimulation: . . . . .	14
2.3	Statistische Grundlagen . . . . .	17
2.4	Modellsysteme und Wechselwirkungspotentiale . . . . .	22
2.5	Integrationsmethoden für kontinuierliche Potentiale . . . . .	27
2.6	Zeitschrittwahl . . . . .	33
2.7	Abschneideradien für Potentiale . . . . .	35
2.8	Kraftberechnung für Kontaktkräfte (Harte Kugeln bzw. Stufenpotentiale) . . . . .	36
2.9	Kurzreichweitige Potentiale . . . . .	39
2.10	Numerische Methoden für langreichweitige Potentiale . . . . .	42
2.10.1	P <sup>3</sup> M - Particle-Particle-Particle-Mesh-Code . . . . .	42
2.10.2	Hierarchischer Treecode . . . . .	46
2.10.3	Fast Multipole Method - FMM . . . . .	51
2.11	Periodische Randbedingungen . . . . .	54
2.12	‘Minimum-Image’-Methode . . . . .	54
2.13	Ewald-Methode . . . . .	55
2.14	Auswertung der Resultate . . . . .	58
2.14.1	Erhaltungsgrößen des Systems . . . . .	58
2.14.2	Statistische Ensemble und Fehlerberechnung . . . . .	60
2.15	Einfache thermodynamische Mittelungen . . . . .	62
<b>3</b>	<b>Hydrodynamik</b>	<b>66</b>
3.1	Einleitung . . . . .	66
3.1.1	Eulergleichungen . . . . .	67
3.1.2	Navier-Stokes-Gleichung . . . . .	74
3.2	Klassifikation partieller Differentialgleichungen . . . . .	76
3.3	Hydrodynamische Gleichungen . . . . .	81
3.4	Taylor-Entwicklung und Fehler in der Ortsvariablen . . . . .	82

3.5	Erhaltungsgrößen . . . . .	84
3.6	Taylorentwicklung und zeitlicher Fehler . . . . .	85
3.7	Transporteigenschaften von Finite Differenzenmethoden . . . . .	88
3.8	Monotonität . . . . .	93
3.9	Operator Splitting . . . . .	100
3.10	Zustandsgleichung und Viskosität . . . . .	102
3.11	Stoßwellen . . . . .	105
<b>4</b>	<b>SPH - Smoothed Particle Hydrodynamics</b>	<b>109</b>
<b>5</b>	<b>Magnetohydrodynamik - MHD</b>	<b>115</b>
<b>6</b>	<b>Strahlungshydrodynamik</b>	<b>120</b>
<b>7</b>	<b>Übungen</b>	<b>125</b>
<b>8</b>	<b>Projekte</b>	<b>135</b>

# 1 Einführung:

## 1.1 Simulation astrophysikalischer Systeme: Warum, wozu und wie?

kosmische Objekte sind nicht manipulierbar

→ (in der Regel) keine Experimente möglich

Menschenleben kurz im Vergleich zu kosmischen Zeitskalen

→ Wie sehen nur Momentaufnahmen des Kosmos!

Frage: Entwicklung kosmischer Objekte?

physikalische Prozesse

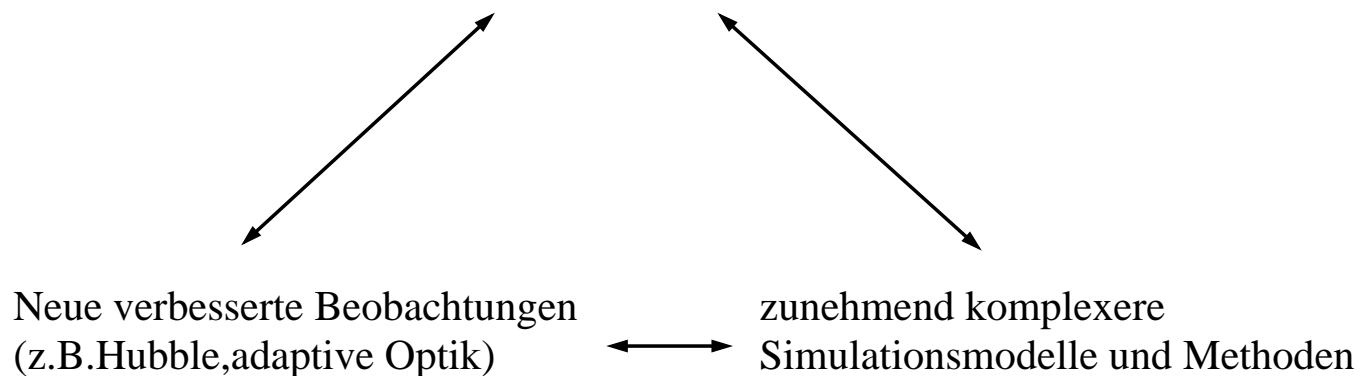
- oft nicht direkt beobachtbar (z.B. Sterninneres)
- extreme Bedingungen (z.B. Dichte und Temperatur im Inneren der Sonne)

→ **Ziel:**

aus einer Vielzahl möglicher Prozesse, die bestimmen, die die Beobachtung erklären.

→ **Simulationen**

## Verständnis astrophysikalischer Probleme



- a) Beobachtung als Test für das Modell der Simulation
- b) Interpretation von Beobachtungen
- c) Vergleich zu analytischen Modellen

### Wie geht man bei der Simulation eines dynamischen Problems vor?

- Direkte Beschreibung des Vielteilchensystems
- Materie wird als Gas oder Flüssigkeit behandelt  $\rightarrow$  Hydrodynamik

Bei beiden Methoden:

- Diskretisierung in Raum und Zeit. Als Folge davon sind Fehler unvermeidbar.
- Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie, Zusammensetzung, usw.
- + Transportprozesse, Magnetfelder etc.

## Benötigte Rechnerressourcen

Beispiel: Typische heutige Hydrodynamiksimulation:

$10^2$ - $10^3$  Zellen/Raumdimension

3-20 Variablen pro Zelle

$10^3$  -  $10^5$  Zeitschritte

$10^2$  -  $10^3$  Operationen/Zelle/Variable/Zeitschritt

$\implies 10^{10}$  (1D) -  $10^{18}$  (3D) Rechenoperationen pro Simulation

moderne Parallelrechner  $\sim 10^{12}$  Operationen/sec

$\implies$ 

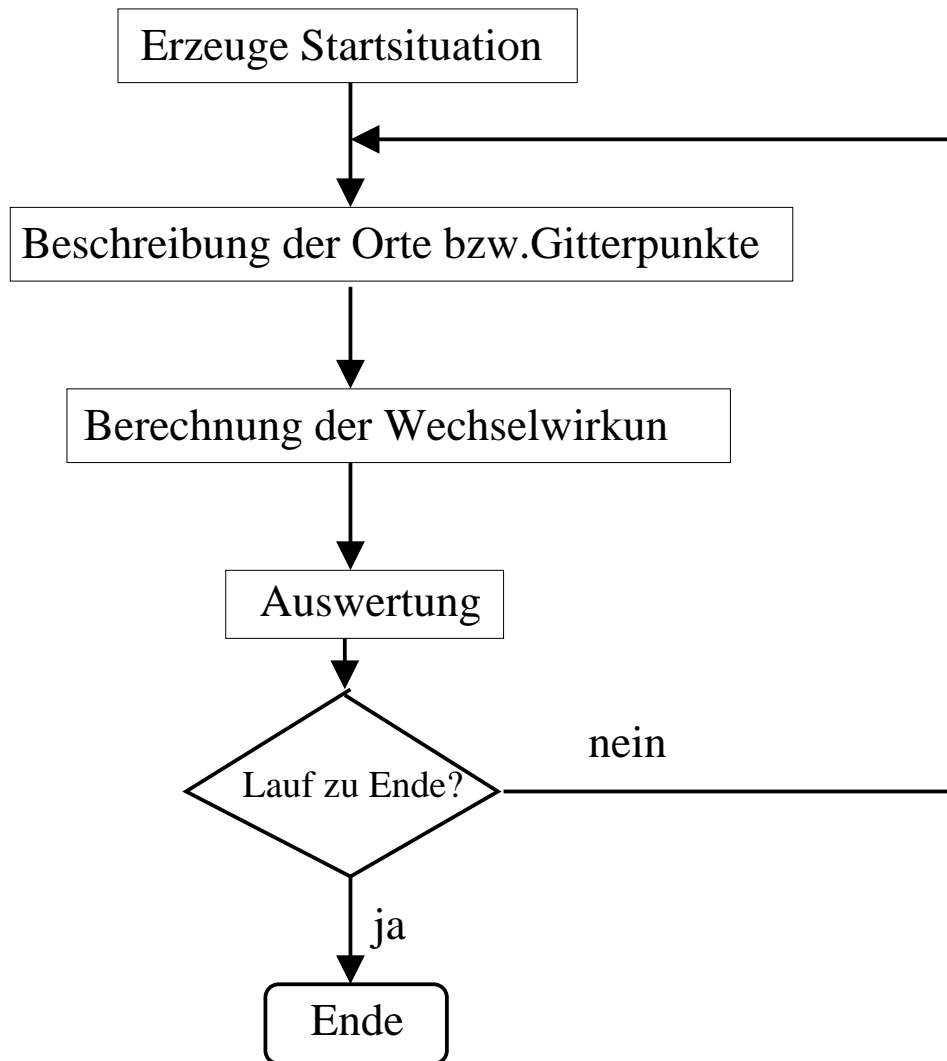
$\sim 100$ Stunden/ 3D - Simulation
-------------------------------------

weitere Anforderungen: Speicherplatz

typischerweise  $\sim 100$  GByte



## 1.2 Prinzipieller Aufbau der Simulation eines dynamischen Problems



Simulation sollte wieder startbar sein, damit man sie in Teilschritte zerlegen kann.

## **Anfangskonfiguration**

### **Vielteilchensimulation:**

Positionen, Geschwindigkeiten, etv.Orientierungen, Drehmomente

Teilchen müssen entsprechend einer vorgegebenen Funktion Raum abdecken, so daß Bedingungen für Dichte etc. erfüllt sind.

### **Hydrodynamik: Gitter**

An Gitterpunkten wird Dichte entsprechend Funktion zugeordnet.

Man kann grob sagen, daß im Prinzip bei Vielteilchensimulationen es schwieriger ist die Anfangskonfiguration zu erstellen als bei hydrodynamischen Simulationen. Hingegen ist der generelle Ablauf einer Vielteilchensimulation einfacher als bei einer hydrodynamischen Simulation.

### **Unterschiedliche Randbedingungen:**

- **offene Systeme** (z.B.Galaxiedynamik)

unterschiedliche Methoden:

- Simulationsbox wird Systemgröße in jedem Zeitschritt angepaßt
  - kein Teilchen verläßt Simulationsgebiet
- feste Größe der Simulationsbox
  - physikalisch sinnvolle Behandlung für Teilchen, die das

Simulationsgebiet verlassen nötig (z.B. Teilchenzahl reduzieren, reflektierende Wände etc.)

In der Regel wird hierbei das vollständige System beschrieben.

- **Geschlossene Systeme - Periodische Systeme**

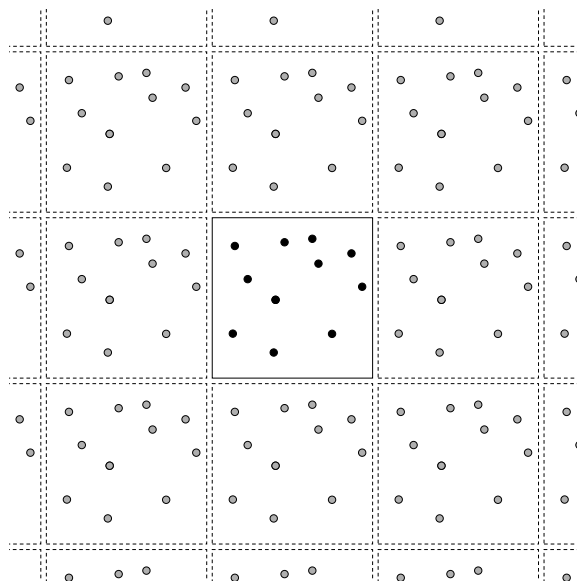
Wenn man z.B. ausgedehnte Flüssigkeits- oder Gassysteme simuliert, muß man einen geeigneten Ausschnitt wählen, um Oberflächeneffekte auszuschließen.

Ansonsten  $\rightarrow$  winziges Tröpfchen, beschreibt nicht die charakteristischen Eigenschaften des Systems.

Bsp: kubisches Gitter  $N=512$  Teilchen, 296 Teilchen sitzen an Oberfläche (58%).

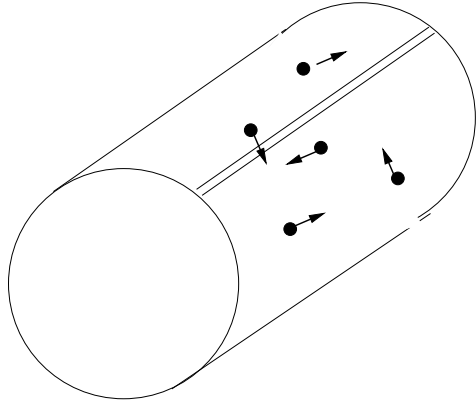
## Periodische Randbedingungen

Der Raum wird mit identischen kubischen Simulationsboxen in Gitterform aufgespannt.



2-dim. Bild von periodischen Randbedingungen: Simulationsbox auf

Torus aufgewickelt.



Man erhält ein **fiktives** unendliches System.

Wenn sich ein Teilchen der ursprünglichen Simulationsbox bewegt, bewegen sich alle dessen periodischen Abbilder in gleicher Weise. Wenn ein Teilchen die ursprüngliche Box verläßt, kommt das entsprechende Abbild durch die gegenüberliegende Wand herein.

Zahl der Teilchen in zentraler Box bleibt konstant. Man speichert nur die Koordinaten etc. der Teilchen, die sich gerade in der zentralen Box befinden.

Wenn man die Wechselwirkung eines Teilchen berechnet, muß man auch die Wechselwirkung mit den Abbildern einbeziehen.

## 2 Vielteilchensimulation

### 2.1 Einleitung

Physikalisches System besteht aus Ansammlung von Teilchen, die in bestimmter Weise wechselwirken.

Beispiele:

- Universum: Astronomische Körper wechselwirken gemäß Newtonschem Gravitationsgesetz
- Plasmen: Coulombkräfte wirken zwischen geladenen Teilchen
- Flüssigkeiten: Teilchen wechselwirken über Lennard-Jones-Potential

Motivation für solche Systeme Vielteilchensimulation zu verwenden:

- Wegen hoher Teilchenzahl nur numerische Behandlung der Zustände des Systems möglich (z.B. keine allgemeine analytische Lösung für  $N > 2$  bei Gravitationskraft).
- Nur sehr wenige Probleme der statistischen Mechanik sind exakt lösbar (Bsp.: 2D-Ising Modell) und nur einige Probleme sind unter der Annahme von Näherungen behandelbar
- Großteil der Probleme der stat. Mechanik sind nur mit starken Näherungen oder gar nicht zugänglich (z.B.: Nichtgleichgewichtssysteme)

## 2.2 Grundgedanke der Vielteilchensimulation:

Numerische Behandlung der Wechselwirkung der  $N$  Teilchen des Systems und die Berechnung interessierender Größen (Struktur, Zustandssumme, Transport etc.)

Grundsätzlich 2 Arten der Vielteilchensimulation:

- **Monte-Carlo-Simulation (MC)** - Energiebetrachtung
- **Molekulare Dynamik (MD)** - Lösung der Bewegungsglg.

In Astrophysik meist Beschreibung der Dynamik eines Systems relevant, daher Molekulare Dynamik (MD)- Methode.

### Historischer Rückblick

Anfang:	Wechselwirkung von mehr als zwei Körpern → Planetenbewegungen
1870	Babbage baut erste Maschine zur Berechnung astronomischer Tabellen (erster Computer)
1901	Kelvins Assistent(?) erzeugte 5000 Trajektorien um die elastische Streuung von Teilchen an gebogenen Wänden zu untersuchen.
1908	W.S. Gossett schätzte Korrelationskoeffizienten mit Hilfe von Ensemblemittelung
1945	v. Neumann, Ulam fanden theoretischen Zusammenhang zwischen Wahrscheinlichkeit und stat. Mittelung über Ensemble
1947	MC: v. Neumann, Ulam, Metropolis: Diffusion von Neutronen in Spaltmaterial
1953	Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller & Teller (Metropolis.-Alg.) idealisiertes System (harte Kugeln oder Scheiben)

1957	Wood, Parker: MC für Lennard-Jones-Potentiale
1959	Alder, Wainwright: Studies in Molecular Dynamics
1964	Aarseth führt individuelle Zeitschritte ein
1978	Tremaine simuliert Galaxienwechselwirkungen
1986	Barnes-Hut entwickeln Treealgorithmus

### **Vielteilchensimulation:**

Einfache Idee, aber Rechenzeit steigt rapide mit wachsender Teilchenzahl  $N$ :

WW zwischen allen Teilchenpaaren berechnen, bedeutet:

### **$N^2$ -Rechenzeit**

Teilchenzahl	Rechenzeit/Zeitschritt	10 000 Zeitschritte
100	0.006sec	1 min
1000	0.74sec	2 h 7min
10 000	70 sec	über 9 Tage
100 000	2 Stunden	fast 3 Jahre

Für hohe Teilchenzahlen (d.h. gute Statistik) teuer! Falls möglich, alternative Behandlungsmethode, falls nicht

**effizientes numerisches Verfahren essentiell!**

## Beispiele der Anwendung

### Typische Systeme in der Astrophysik:

Kosmische Entwicklung, Entstehung und Entwicklung von Planetensystemen, Galaxien, Sternhaufen, Sterninnere, etc.

Aber auch in anderen Gebieten der Physik: Flüssigkeiten, dichte Plasmen, Polymere, Flüssigkristalle, Festkörper mit Deformationen und Sprüngen, Teilchenstrahlen, Proteine ....

### MD und ihre Grenzen

- meist nichtrelativistisch  
relativistisch - Information nicht schneller als Licht  
MD - nimmt Kräfte mit implizit unendlich schneller Informationsübertragung an
- überwiegend klassische Systeme  
Ausnahme: 'Quantenmolekulare Dynamik' (noch in den Anfängen)  
QM basiert auf Unschärfeprinzip von Ort und Impuls, MD benötigt (und liefert) vollständige Information über Orte und Geschwindigkeiten zu jedem Zeitpunkt. QM-Effekte können allerdings in MD-Simulationen durch semiklassische Korrekturen berücksichtigt werden.
- nur begrenzte Rechenzeit verfügbar



- begrenzter Speicherplatz
- kleine Systeme verstärken Fluktuationen  
Frage: Ist Meßgenauigkeit gut genug?
- ‘Finite-size’-Effekte
- Tritt Effekt häufig genug während Rechendauer auf um signifikante Aussage zu machen?

### 2.3 Statistische Grundlagen

Makroskopische Eigenschaften der Materie (Druck, Temperatur etc.) werden aus mikroskopischen Struktur hergeleitet.

—→ Man interessiert sich nur für Mittelwerte bzw. wahrscheinlichste Werte.

Wahrscheinlichkeit für diskrete Verteilung

$$w(i) = \frac{\sum n_i g_r}{\sum n g_r}$$

Wahrscheinlichkeit  $w$  eines Ereignisses  $i$  ist der Quotient der Summe der stat. Gewichte der günstigen Fälle  $n_i$  zu den möglichen Fällen  $n$ .

### Mittelwert und Schwankungen

Mittelwert einer Eigenschaft  $x$  bei einer Verteilung  $w_x$  bzw.  $w(x)$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \sum x w_x & \sum w_x &= 1 \\ \langle x \rangle &= \int x w(x) dx & \int w(x) dx &= 1 \end{aligned}$$

Schwankung: Abweichung vom Mittelwert:  $\langle f(x) - \langle f(x) \rangle \rangle = 0$

Schwankungsquadrat :

$$\begin{aligned}\langle (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 \rangle &= \sum (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 w_x \\ \langle (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 \rangle &= \int (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 dw\end{aligned}$$

relatives Schwankungsquadrat:

$$\frac{\langle (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 \rangle}{\langle f(x) \rangle^2} = \frac{\langle f(x)^2 \rangle - \langle f(x) \rangle^2}{\langle f(x) \rangle^2}$$

verschwindet für makroskopische Systeme mit  $N \rightarrow \infty$ .

### Statistik im Phasenraum:

Mechanisches System von  $f$  Freiheitsgraden wird mechanisch vollständig durch  $2f$  Größen definiert.

Momentaufnahme der Verteilung der Teilchen

→ Vektor  $\mathbf{q}_i(t)$  mit  $i=1, \dots, N$

→ Punkt im Phasenraum, da  $\mathbf{q}_i(t)$  zeitabhängig, erst durch Angabe von Geschwindigkeit bzw. Impuls vollständig festgelegt.

Man betrachtet eine große Anzahl von physikalisch gleichartigen Systemen (Hamilton-Fkt. hängt in gleicher Weise von den generalisierten Koordinaten und Impulsen ab).

Bsp.: Systeme von  $N$  Punkten mit gleicher Energie

Man untersucht wie sich im Mittel die Systeme einer solchen Gesamtheit verhalten → **Wahrscheinlichkeitsaussagen** (Gibbssche Modell).

Voraussetzung: Phasenraumpunkte sind unabhängig voneinander.

Phasendichte  $\rho(q, p, t)$ : Wahrscheinlichkeit, das System im Gebiet  $q \dots q + dq, p \dots p + dp$  anzutreffen. Da man das System mit Sicherheit im ge-

samten Phasenraum findet, gilt:

$$\int \rho(q, p, t) dq dp = 1$$

Reduzierte Teilchenfunktion:  $\rho^{(k)}(q, p, t)$ :

Wahrscheinlichkeit  $k$  Teilchen im Gebiet  $q \dots q + dq, p \dots p + dp$  anzutreffen. (Integration über nicht-relevante Zustände).

Für verdünnte Systeme meist ausreichend: Zwei-Teilchenfunktion:

$$\rho^{(2)}(q, p, t) = \int \rho^{(N)}(q, p, t) dq^{N-2} dp^{N-2}$$

Dichtezahl des Systems:

$$n(q) = \int \rho(q, p, t) dp$$

Paarverteilungsfunktion  $g(q_i, q_{ij})$ : Maß für die Korrelation der Positionen von Teilchenpaaren:

$$\int \rho^{(2)}(q, p, t) dp = \int \rho^{(1)}(q, p, t) dp_i \int \rho^{(1)}(q, p, t) dp_j g(q_i, q_{ij})$$

Isotrope Systeme  $\rightarrow$  radiale Verteilungsfunktion.

Bestimmung struktureller, thermodynamischer und dynamischer Eigenschaften.

**Verschiedene Systeme**  $\rightarrow$  verschiedene Ansätze in der Simulation

- Abgeschlossene Systeme (kein Energie- oder Materieaustausch)
- Geschlossene Systeme (Energie-, aber kein Materieaustausch)

- Systeme mit Energie und Materieaustausch

## Unterschiedliche Gesamtheiten

- Mikrokanonische Gesamtheit  
Abgeschlossenes System, konstante Energie  $E$ , Volumen  $V$  und Teilchenzahl  $N$ , Phasendichte  $\sim \delta(H - E)$
- Kanonische Gesamtheit  
geschlossenes System, Wärmebad, konstant:  $T, V, N$ , Phasendichte  $\sim \exp(-H/kT)$
- $T, p, N$ -Gesamtheit Phasendichte  $\sim \exp(-(H + pV)/kT)$
- Großkanonische Gesamtheit  $T, V, \mu$  (chemisches Potential) konstant  
Phasendichte  $\sim \exp(-(H - \mu N)/kT)$

für  $N \rightarrow \infty$  sowie  $N/V = \text{const.}$  liefern alle Gesamtheiten äquivalente Ergebnisse.

## Meß-, Zeit-, und Ensemblemittel

Betrachtet man ein System für eine bestimmte Zeit  $\tau = l\Delta t$  und wird die Größe  $A(q(t), p(t))$   $l$ -mal in Zeitschritten von  $\Delta t$  gemessen, gilt

$$\langle A \rangle_\tau = \frac{1}{\tau} \sum_{n=1}^{n=l} A(l\Delta t). \quad (1)$$

Um den Mittelwert  $\langle A \rangle_t$  zu bestimmen, muß die Meßdauer  $\tau \rightarrow \infty$  und  $\Delta t \rightarrow 0$  gehen

$$\langle A \rangle_t = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A(q(t), p(t)) \cdot dt$$

Im Gegensatz dazu wird der Ensemblemittelwert aus beliebig ausgewählten Punkten im Phasenraum bestimmt

$$\langle A \rangle_{\Gamma} = \int \int A(\Gamma) \rho(\Gamma) dpdq \quad (2)$$

Für Systeme, für die **Ergodenhypothese** zutrifft, gilt:

**Zeit- und Ensemblemittel sind gleich!**

Daher wird Gleichung 1 bei der Computersimulation für die Molekulardynamik und Gleichung 2 für das Mont-Carlo-Verfahren als Ausgangspunkt für die Mittelwertbildung in den verschiedenen Gesamtheiten benutzt.

### Monte-Carlo-Simulation

Ersetzt Phasenraumintegral durch eine Summe über Zustände

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_s A(s) \exp(-\beta U(s))}{\sum_s \exp(-\beta U(s))}.$$

Danach werden die Zustände gewichtet

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_s W^{-1}(s) A(s) \exp(-\beta U(s))}{\sum_s W^{-1}(s) \exp(-\beta U(s))},$$

wobei  $W(s)$  eine Wahrscheinlichkeitsfunktion darstellt. Mit der Bedingung  $W(s) = \exp(-\beta U(s))$  reduziert sich dies zu einer einfachen Mittelung über  $s$  Zustände des Systems

$$\langle A \rangle = \frac{1}{s} \sum_{s=1}^s A(s). \quad (3)$$

MC betrachtet nur den Konfigurationsraum und **eliminiert** den Geschwindigkeitsraum des Phasenraums. Da keine Dynamik betrachtet wird, können in dieser Form nur Gleichgewichtszustände des Systems direkt untersucht werden.

## Molekulare Dynamik

Wenn Ergodenhypothese gültig, dann entspricht der Ensemblemittel dem Mittelwert der Messungen der natürlichen zeitlichen Entwicklung eines einzelnen Gleichgewichtszustandes. MD-Simulationen verfolgen die Dynamik eines einzelnen Systems und Mittelwerte werden in der Form

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{M=1}^s A_\mu(\mathbf{r}_N) \quad (4)$$

durch eine zeitliche Reihe von Messungen an diesem System erhalten.

Molekulare Dynamik beschreibt in seiner ursprünglichen Form mikrokanonische Systeme.

Wenn die Anzahl der Messungen ausreichend ist, führen MD und MC für Gleichgewichtssysteme zu identischen Ergebnissen.

### 2.4 Modellsysteme und Wechselwirkungspotentiale

Für klassische Systeme, bestehend aus  $N$  Teilchen mit den Koordinaten  $\mathbf{q}_i$  und den Momenten  $\mathbf{p}_i$  mit

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \\ \mathbf{p} &= (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N), \end{aligned}$$

ist die Hamilton-Funktion gegeben durch

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}),$$

wobei die kinetische Energie  $E$  i.A. die Form

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} p_{i\alpha}^2 / 2m_i$$

hat, wobei  $\alpha$  die (x,y,z)-Komponenten durchläuft.

Die potentielle Energie  $V(q)$  enthält die relevante Information über die Wechselwirkung der Teilchen.

Für nicht zu komplexe  $V(\mathbf{q})$  ist es möglich, aus  $H$  die Bewegungsgleichung zu konstruieren, die das gesamte zeitliche Verhalten des Systems beschreibt. Die Kenntnis des Potentials ist die Basis für eine vollständige Beschreibung aller Eigenschaften des Systems.

Sinnvolle Wahl des Wechselwirkungspotentials ist wichtige Voraussetzung dafür, daß Simulationsmethoden für Modellierung realer Systeme eingesetzt werden können.

Allgemeine Form des Potentials:

$$V = \sum_i V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_i \sum_{j>i} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (5)$$

$V_1$ : externes Feld (magnetisch etc.)

$V_2$ : Paarpotential

$V_3$ : Dreierpotential (Bsp. Edelgase in fcc- Festkörpergittern)

potentielle Energie	$V_2$
bei paarweiser WW	$= \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_j^N u_2(q_i, q_j)$
wenn nur abstandsabhängig	$= \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_j^N u_2(r_{ij})$

- **Langreichweitige Kräfte (Coulomb, Gravitation)**

Alle WW zwischen allen Teilchen sind zu berücksichtigen

- **Kurzreichweitige Kräfte(Lennard-Jones)**

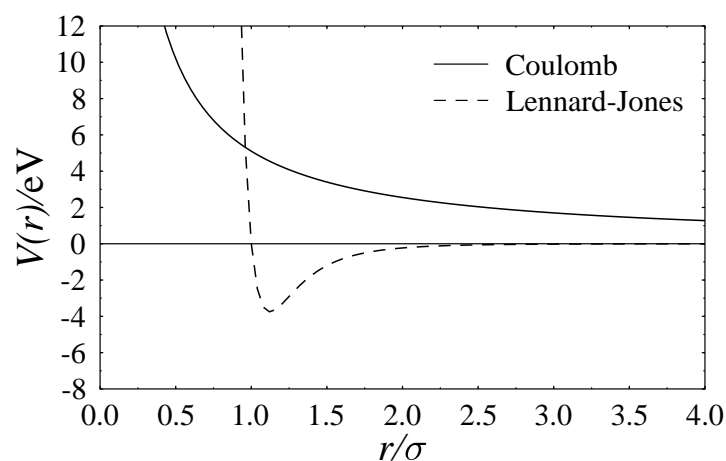
Es genügt die Berücksichtigung der WW relativ benachbarter Teilchen

- **Harte Kugeln**

Nur die aktuellen Stoßpartner müssen gefunden werden

## Langreichweitige Kräfte

Gravitations-, Coulombwechselwirkung:  $V(r) = \alpha/r$



Numerisch aufwendig, da WW zwischen allen Teilchen berücksichtigt werden müssen  $\rightarrow$



$N^2$ -Abhängigkeit der Rechenzeit

**nur begrenzte Anzahl von Simulationsteilchen möglich!**

Meist kann nicht jedes reale Teilchen des Systems durch ein Simulationsteilchen dargestellt werden.

Man unterscheidet 2 Fälle:

- Jedes der  $N$  Teilchen repräsentiert einen Bruchteil  $N/N_o$  der  $N_o$  Systemteilchen und man simuliert das ganze System.
- Man simuliert nur einen Teil des Systems, aber jedes physikalische Teilchen wird durch ein Simulationsteilchen dargestellt.

Hängt von den Randbedingungen des Systems ab.

### **Anfangspositionen**

Anfangszustand relaxiert zu Gleichgewichtszustand.

Gleichgewichtszustand meist Ausgangspunkt für Simulation.

Bedingungen an Anfangspositionen:

- Resultat muß unabhängig vom Anfangszustand sein!
- Periodische Systeme:  
MD muß repräsentative Region des Systems simulieren.

Ansonsten jede beliebige Konfiguration erlaubt.

Mögliche Anfangspositionen:

- Zufallszahlen (nicht für harte Kugeln, starke Kräfte können Problem sein)
- Gitter (während Simulation verschwindet Struktur)

## Anfangsgeschwindigkeiten

Je nach gegebener Situation vorgegebene Richtung oder Zufallszahlen.

Zufallszahlen: Beliebige Richtung, aber Betrag gegeben durch Temperatur des Systems. Falls keine äußere Vorzugsrichtung:

$$\mathbf{p} = \sum_{i=1}^N m_i v_i = 0.$$

Wichtig, um künstlichen Fluß zu vermeiden, speziell bei periodischen Randbedingungen.

Einschwingvorgang nicht beendet, so lange noch systematische Drifts der Größen auftreten. Wenn Einschwingvorgang beendet, nur stetige Oszillationen um Mittelwert.

Vorgegebene Temperatur:

- geht während Einschwingvorgang verloren
- Geschwindigkeiten müssen nach Einschwingvorgang reskaliert werden.

Bei Reskalierung muß berücksichtigt werden, daß Temperatur fluktuiert, daher Skalenfaktor  $\sim \langle T \rangle$ .

## Randbedingungen

**Sind die Eigenschaften des periodischen Systems und des makroskopischen Systems identisch?**

Hängt von der Reichweite des Systems und den untersuchten Eigenschaften ab.

Für kurzreichweitige Kräfte (z.B. Lennard-Jones) haben periodische Randbedingungen nur wenig Einfluß auf das Ergebnis. Kritischer sind langreichweitige Kräfte (z.B. Coulombkräfte), da periodische Randbedingungen langwellige Fluktuationen abschneiden.

Test: Ergibt Simulation mit größerer Teilchenzahl gleiches Ergebnis?

## 2.5 Integrationsmethoden für kontinuierliche Potentiale

Integrationsmethoden basieren auf Taylor-Entwicklung der klassischen kontinuierlichen Trajektorien

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_s(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_s(t) + \mathbf{v}_s(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}_s(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}\dots \\ \mathbf{v}_s(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_s(t) + \mathbf{a}_s(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{b}_s(t)(\Delta t)^2 + \dots \\ \mathbf{a}_s(t + \Delta t) &= \mathbf{a}_s(t) + \mathbf{b}_s(t)\Delta t + \dots \quad .\end{aligned}$$

Wunschliste an Integrationsalgorithmus

1. schnell, wenig Speicherbedarf
2. langer Zeitschritt  $\Delta t$
3. genaue Trajektorie

4. Energie - und Impulserhaltend

5. einfach

### Euler-Algorithmus

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + O((\Delta t)^2)$$

$$\mathbf{v}(t - \Delta t) = \mathbf{v}(t) - \mathbf{a}(t)\Delta t + O((\Delta t)^2)$$

Meist zu großer Fehler (siehe Übungen)

### Verlet-Algorithmus

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}\dots \\ \mathbf{r}(t - \Delta t) &= \mathbf{r}(t) - \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}\dots\end{aligned}$$

Addition ergibt:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) + \mathbf{r}(t - \Delta t) &= 2\mathbf{r}(t) + \mathbf{a}(t)(\Delta t)^2 \\ \longrightarrow \mathbf{r}(t + \Delta t) &= 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) + \mathbf{a}(t)(\Delta t)^2\end{aligned}$$

Positionen werden bis zur Genauigkeit  $O(\Delta t^4)$  bestimmt

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t$$

$$\mathbf{r}(t - \Delta t) = \mathbf{r}(t) - \mathbf{v}(t)\Delta t$$

Subtraktion ergibt:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t - \Delta t) = 2\mathbf{v}(t)\Delta t$$

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$

Geschwindigkeiten werden bis zur Genauigkeit  $O(\Delta t^2)$  bestimmt. Werden allerdings nicht explizit zur Bestimmung der Positionen verwendet, nur nötig, um z.B. kinetische Energie zu berechnen.

Eigenschaften des Verlet-Algorithmus:

- zeitreversible für konservative Kräfte
- impulserhaltend
- numerische Ungenauigkeit bei kleinem  $\mathbf{a}$ , wegen  $O(\Delta t^2)$

### Leap-frog Algorithmus (Bocksprung)

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t + \Delta t/2)\Delta t \\ \mathbf{v}(t + \Delta t/2) &= \mathbf{v}(t - \Delta t/2) + \mathbf{a}(t)\Delta t\end{aligned}$$

Orte und Geschwindigkeiten werden für verschiedene Zeitpunkte berechnet.

Will man potentielle und kinetische Energie zum gleichen Zeitpunkt berechnen, verwendet man

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{v}(t - \Delta t/2) + \mathbf{v}(t + \Delta t/2)}{2},$$

oder die Geschwindigkeitsversion des Leap-frog Algorithmus:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \mathbf{a}/2(\Delta t)^2 \\ \mathbf{v}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}(\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t))\Delta t.\end{aligned}$$

Verlet und Leap-frog-Algorithmus sind äquivalent (können in einander umgeformt werden).

Leap-Frog:

Vorteil: keine Differenzen zwischen großen Werten, um kleine Werte zu erhalten

Nachteil: Geschwindigkeiten nicht direkt zugänglich

Beide Algorithmen zeigen sehr gute Stabilität des Mittelwertes der Gesamtenergie, allerdings kann der momentane Wert der Gesamtenergie

stark schwanken. Bei genaueren Algorithmen (höhere Terme in Taylor-Entwicklung) treten solche Schwankungen weniger auf, doch ist das Wegdriften des Mittelwertes möglich.

## Runge-Kutta-Verfahren

Für einen bestimmten Wert von  $\chi$  wird folgende Gleichung exakt:

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) &= r(t) + \tau \frac{dr(\chi)}{dt} \\ &= r(t) + \tau f(r(\chi), \chi) \end{aligned}$$

Beim Euler-Verfahren verwendet man diese Gleichung mit der Annahme  $\chi = t$ . Beim Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung :  $\chi = t + \frac{1}{2}\tau$ . Da auch  $r(t + \frac{1}{2}\tau)$  nicht bekannt ist, ist die einfachste Annahme  $r^*(t + \frac{1}{2}\tau)$  mit dem Euler-Verfahren zu bestimmen und dieses Ergebnis gleich  $r(t + \frac{1}{2}\tau)$  zu setzen.

Das Runge-Kutta-Verfahren 2.Ordnung ist dann in der üblichen Schreibweise gegeben durch.

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) &= x(t) + \frac{k_1}{2}\Delta t f(x(t), t) + \frac{k_1}{2}\Delta t f(x^*(t), t), \\ \text{wobei} \quad x^* &= x(t) + \Delta t f(x(t), t) \end{aligned}$$

In ähnlicher Weise erhält man das **Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung**:

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) &= x(t) + \frac{k_1}{6}\Delta t [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] + O(\Delta t^5) \\ k_1 &= \Delta t f(x, t) \\ k_2 &= \Delta t f\left(x + \frac{\Delta t}{2}k_1, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ k_3 &= \Delta t f\left(x + \frac{\Delta t}{2}k_2, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned}$$

$$k_4 = \Delta t f(x + \Delta t k_3, t + \Delta t)$$

Falls man eine höhere Genauigkeit der Trajektorien benötigt, kann man zu Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung übergehen.

Für gegebenes Zeitintervall  $\Delta t$  kann Genauigkeit erhöht werden durch Integrationsmethoden höherer Ordnung oder 'Prädiktor- Korrektor-Methoden'.

### Prädiktor-Korrektor-Methode (Gear-Methode)

1. Prädiktor

Entwickle Ort und Geschwindigkeit in Taylorreihe

$$r_p(t + \delta t) = r(t) + v(t)\delta t + \dots$$

$$v_p(t + \delta t) = v(t) + a(t)\delta t + \dots$$

$$a_p(t + \delta t) = a(t) + b(t)\delta t + \dots$$

$$b_p(t + \delta t) = b(t) + \dots$$

2. Neue Beschleunigungen aus vorausgesagten Orten unterscheiden sich von denen der Taylorreihe

$$\Delta a(t + \delta t) = a^c(t + \delta t) - a^p(t + \delta t)$$

3. Aus Differenz der Beschleunigungen werden Korrekturen zum Ort etc. berechnet

$$r_c(t + \delta t) = r_p(t + \delta t) + c_0 \Delta a(t + \delta t)$$

$$v_c(t + \delta t) = v_p(t + \delta t) + c_1 \Delta a(t + \delta t)$$

$$a_c(t + \delta t) = a_p(t + \delta t) + c_2 \Delta a(t + \delta t)$$

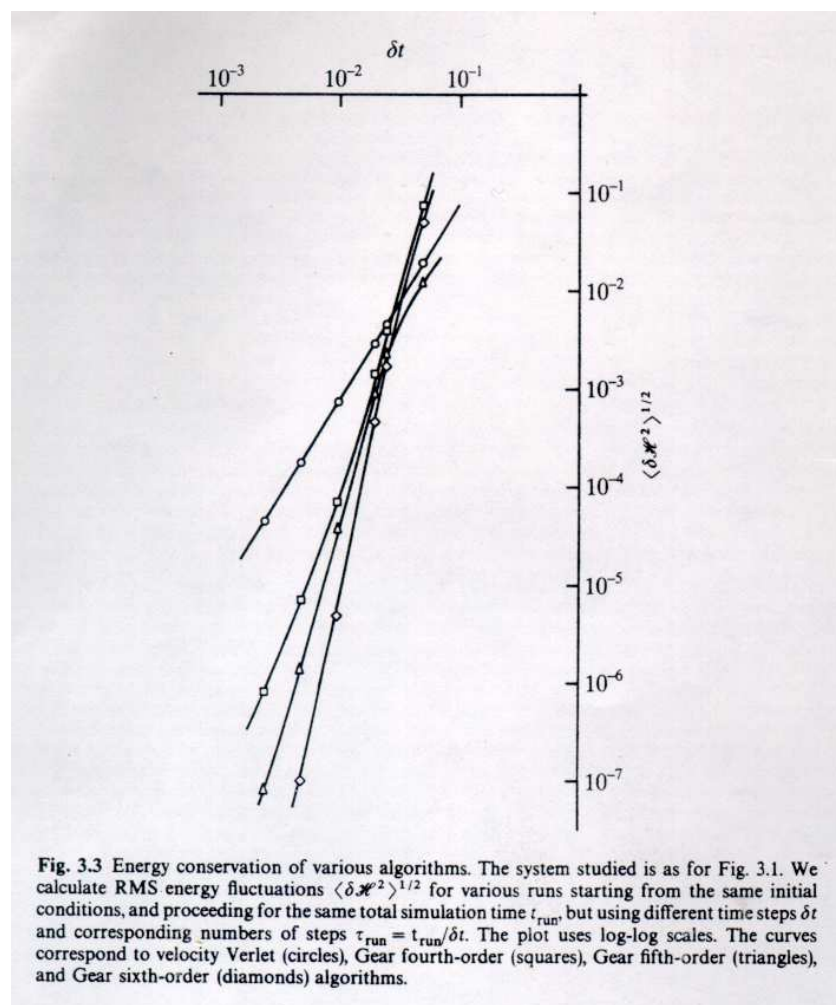
$$b_c(t + \delta t) = b_p(t + \delta t) + c_3 \Delta a(t + \delta t)$$

Werte für  $c_0, \dots, c_n$  je nach Ordnung der Entwicklung:

3.Ordnung	$c_0 = 5/12$	$c_1 = 1$	$c_2 = 1/2$	
4.Ordnung	$c_0 = 3/8$	$c_1 = 1$	$c_2 = 3/4$	$c_3 = 1/6$

$r_c$  etc. kann verwendet werden, um besseren Wert  $a_c$  zu erhalten und somit die Genauigkeit des Integrationsschrittes iterativ verbessert werden.

### Welcher Integrationsalgorithmus am besten für MD?



- Hohe Genauigkeit oft nicht gefragt, da **nur Statistik wichtig!**
- Energieerhaltung sehr wichtig!
- Robuste einfache Integratoren weniger fehleranfällig



→ **Am besten geeignete Algorithmen:**

Leap-frog, Runge-Kutta niedriger Ordnung, Gear, Prädiktor-Korrektor.

Vor- und Nachteile der Algorithmen:

- Für kurzreichweitige Kräfte kann Runge-Kutta nicht über ein gewisses  $\Delta t$  hinausgehen, Leap-frog oder Prädiktor-Korrektor schon.
- Prädiktor-Korrektor besser für komplexe Systeme: Dynamik, geschwindigkeitsabhängige Kräfte, höhere lokale Genauigkeit
- Leap-frog: weniger Arbeit, weniger Speicherplatz, bessere Energieerhaltung für Lennard-Jones-Potentiale

Energieerhaltung der unterschiedlichen Algorithmen (**siehe Abb. 6**)

## 2.6 Zeitschrittwahl

- Ideal:  $T = n_t \Delta t$  so groß wie möglich, um relevante makroskopische Zeitskala zu modellieren, wobei  $T$ , Gesamtsimulationszeit,  $n_t$  Anzahl der Zeitschritte,  $\Delta t$  Zeitschrittlänge.
- Sinnvolle Simulation nur, wenn der akkumulierte Fehler über  $T$  nicht signifikant.
- Energieerhaltung muß gewährleistet sein.

$\Delta t$  größer, Genauigkeit der Simulations wird rapide schlechter (besonders ausgeprägt bei Systemen mit nahen Stößen).

Wichtiger Parameter: **Stoßfrequenz**  $\bar{\nu}$ :

$$\bar{\nu} = \frac{v_{therm}}{\lambda} \simeq \frac{\langle v^2 \rangle^{1/2}}{\lambda}$$

wobei  $v_{therm}$  thermische Geschwindigkeit,  $\lambda$  mittlere freie Weglänge  $\lambda = \frac{1}{n\sigma}$  mit Teilchendichte  $n$  und Wirkungsquerschnitt  $\sigma$ .

$\Delta t$  muß klein im Vergleich zu  $1/\bar{v}$  sein:

$$\Delta t_1 < \frac{1}{n\sigma} \frac{1}{\langle v^2 \rangle^{1/2}}.$$

Wenn Teil des Systems nahe Stöße erfährt  $\rightarrow$  schnelle Änderung von Potentialen und Kräften  $\rightarrow$  kleiner Zeitschritt nötig:

$$\Delta t_2 < \alpha \sqrt{2 \min(r_{ij}) \frac{m}{F}},$$

wobei Weg vereinfacht zu  $s = \frac{1}{2} F / m t^2$  und  $\min(r_{ij})$  Distanz zu nächstem Nachbarn.

Bei langreichweitiger Kräften  $F = \beta / r^2$  ergibt dies:

$$\Delta t_2 < \alpha_2 [\min(r_{ij})]^{3/2}.$$

Falls eines der Teilchen im Stoß eine sehr hohe Geschwindigkeit hat, kann dieser Zeitschritt immer noch zu groß sein, dann

$$\Delta t_3 < \alpha \left[ \min \frac{r_{ij}}{v_{ij}} \right].$$

Um den Weg jedes Teilchens genau genug zu berechnen, muß man  $\Delta t$  so wählen, daß gilt:

$$\Delta t = \min(\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3). \quad (6)$$

Korrekt, aber teuer. Nicht für alle Teilchen ist ein solch kleiner Zeitschritt nötig

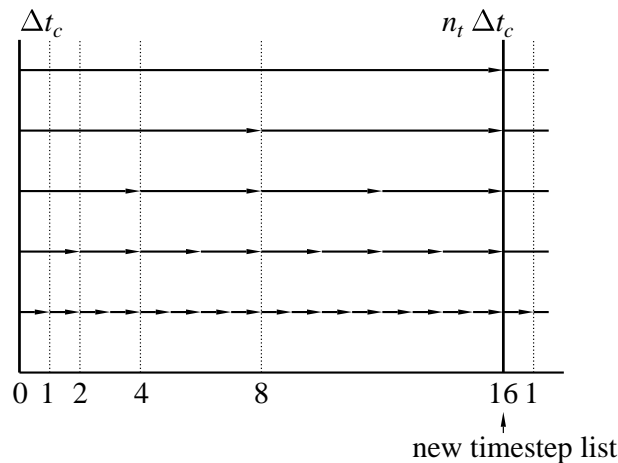
## → 'Multiple-time step'-Algorithmen

Teilchen, zwischen denen starke Kräfte wirken, bekommen kleinen Zeitschritt  $\sim \Delta t_3$ , andere größeren Zeitschritt.

Die Änderung der langsam veränderlichen Kräfte kann entweder mit Hilfe der Taylorentwicklung in jedem Zeitschritt berücksichtigt oder über mehrere Zeitschritte als konstant angenommen werden.

Zwei Methoden der Behandlung unterschiedlicher Zeitschritte

- Blockzeitschritt



- individueller Zeitschritt  
jedes einzelne Teilchen hat seinen eigenen Zeitschritt (siehe Aarseth)

## 2.7 Abschneideradien für Potentiale

- innerer Abschneideradius zur Vermeidung numerischer Probleme

In stoßdominierten Systemen kann es zu sehr engen Stößen kommen, dabei treten bei vielen Systemen starke Gradienten im Po-

tential auf. Die resultierenden Probleme können durch einen Abschneideradius vermieden werden. Für langreichweitige Kräfte z.B.:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \sum_{i,j \neq i} \frac{\alpha(\mathbf{r}_{ij})}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}.$$

Hierbei ist  $\epsilon$  sehr klein.

Bei hohen Dichten sind Potentiale mit quantenmechanischen Korrekturen besser

- **innerer Abschneideradius für stoßfreie Systeme**

Ein entsprechender Ausdruck für die Kraft kann zur Simulation stoßfreier Systeme verwendet werden, allerdings ist  $\epsilon$  dann wesentlich größer,  $\epsilon \sim a_o \sim n^{-1/3}$ .

- **äußerer Abschneideradius für kurzreichweitige Kräfte**  
(z.B. Smoothed-Particle-Hydrodynamics-Algorithmus (SPH))

## 2.8 Kraftberechnung für Kontaktkräfte (Harte Kugeln bzw. Stufenpotentiale)

Astrophysikalisches Beispiel: Staubwachstum in Akkretionsscheiben

Keine festen Zeitschritte, sondern Frage: Wann ist der nächste Stoß ?

→ **Kalenderalgorithmus**

Erste MD Simulationen wurden mit harten Kugeln durchgeführt.

Zwischen Stößen folgt jedes Teilchen seiner linearen Trajektorie (kein numerischer Fehler)

Zeitdifferenz sei  $\tau$ , alle Teilchen werden um  $\tau \mathbf{v}_i$  zu neuen Orten bewegt, nur Geschwindigkeiten der beiden am Stoß beteiligten Teilchen ändert sich.

Teilchen fliegen aufeinander zu, wenn

$$\mathbf{v}_{ij} \mathbf{r}_{ij} < 0,$$

wobei  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  und  $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ .

Zeit  $t_{ij}$  bis zu möglichem Stoß Lösung der Gleichung:

$$(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{v}_{ij} t_{ij})^2 = \sigma^2$$

mit  $\sigma$  Summe der Kugelradien (entspricht Abstand für Stoß).

Lösung:

$$t_{ij} = \frac{1}{v_{ij}^2} \left( -v_{ij} r_{ij} - \sqrt{(v_{ij} r_{ij})^2 - (r_{ij}^2 - \sigma^2) v_{ij}} \right)$$

Wenn Ausdruck unter Wurzel negativ, stoßen Teilchen **nie**.

Änderung der Geschwindigkeit bei Energie- und Impulserhaltung für rein elastischen Stoß :

$$m_i \Delta \mathbf{v}_i = -2 \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \left( \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} v_{ij} \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}.$$

‘Square well’-Potential (keine Energie-, aber Impulserhaltung)

$$m_i \Delta \mathbf{v}_i = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \left( \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} v_{ij} \pm \sqrt{\frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} v_{ij} + \frac{2\epsilon}{m_{ij}}} \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}},$$

wobei  $\epsilon$  Energieänderung für z.B. reaktive Stöße.

Simulation: Sequenz von Stoßereignissen

Problem:  $O(N)$  Rechenzeit nötig, um die nächste Kollision eines Teilchens zu beschreiben.

Zwei Möglichkeiten:

- **lokale Zeitvariable**

Man braucht nicht alle  $t_{ij}$ , sondern nur für jedes Teilchen  $i$  den kleinsten  $t_{ij}$  und den zugehörigen Stoßpartner.

Nur Teilchen in der unmittelbaren Umgebung sind von Interesse, daher wird nur deren aktuelle Position ausgerechnet. D.h. man muß die Zeit des letzten Updates speichern.

- **Zellalgorithmus**

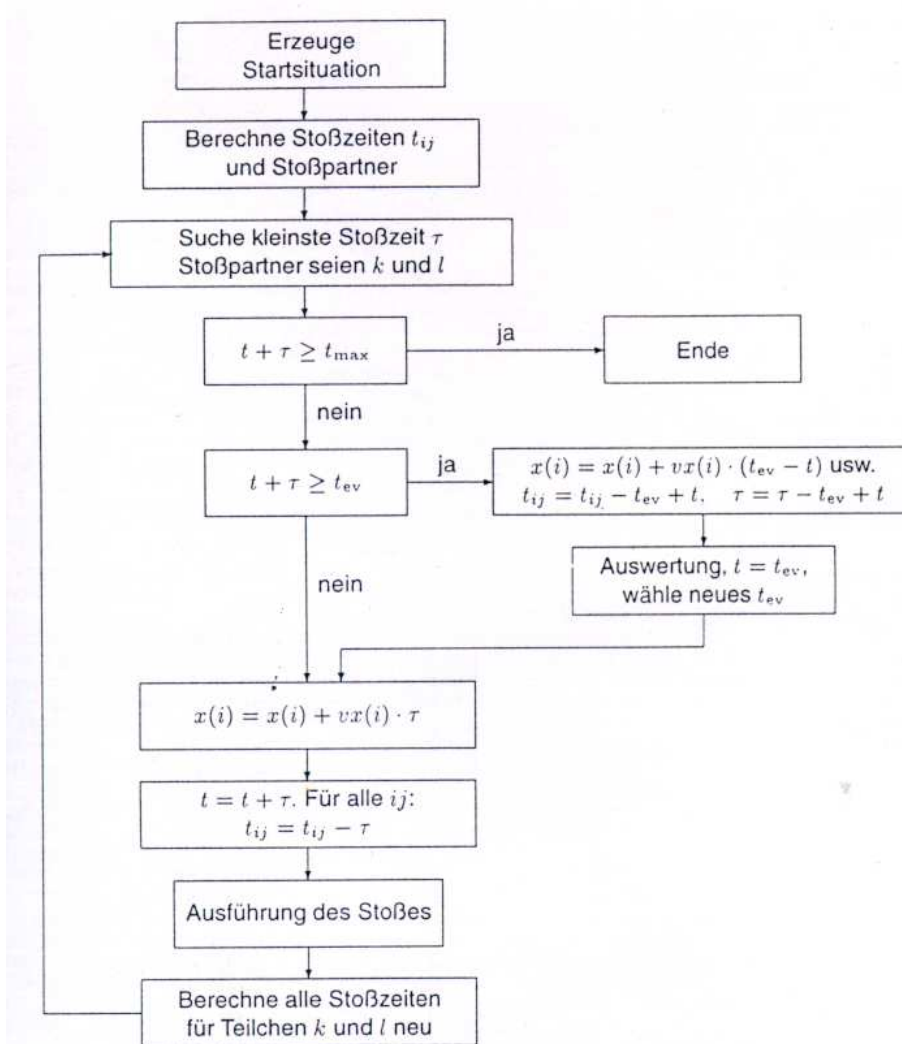


Bild 4.2 Ablaufplan einer Simulation für harte Kugeln

## 2.9 Kurzreichweitige Potentiale

Für Teilchenabstände größer als  $r_c$  praktisch keine Wechselwirkung. Berechnung der Abstände überflüssig bzw. durch Korrekturen behandelbar.

### Nachbarschaftstabellen

Für jedes Teilchen wird Liste von Nachbar angelegt, die innerhalb von  $r_c$  oder wenig außerhalb liegen. Abstände müssen dann nur für Teilchen in Liste berechnet werden.

Listen werden nach gegebenen Zeitinterval aktualisiert.

Der Radius für die Teilchenliste kann aus der mittleren Teilchengeschwindigkeit  $v_m$ , der MD-Schrittweite  $\Delta t$  und  $n_T$  (Zahl der Zeitschritte nach der Liste aktualisiert wird) bestimmen werden

$$r > v_m \Delta t n_T$$

Rechenzeit:

WW und Energie	$\sim N$
Nachbarschaftstabelle	$\sim N^2$ für $n_T \sim 10$
	$\sim N^3$ für große $n_T$

Für  $N > 1000$  sind Nachbarschaftstabellen nicht mehr geeignet.

## ‘Linked lists’ oder ‘linked cells’

MD-Box wird in kleinere Zellen unterteilt ( $\sim N$ ).

Alle Teilchen werden auf Grund ihrer momentanen Position einer Zelle zugeordnet.

Für kurzreichweitige Kräfte genügt es, bei entsprechender Wahl der Zellgröße, nur die Teilchen in derselben oder in Nachbarzellen als mögliche WW-Partner zu betrachten.

Bei ( $M^3$ )-Zellen bei einer Box der Länge L folgt:

$$L/M > r_c.$$

Aus Symmetriegründen müssen nur 14 Nachbarzellen für 3D untersucht werden. 2D-Beispiel:

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
15	14	13	12	11
6	7	8	9	10
5	4	3	2	1

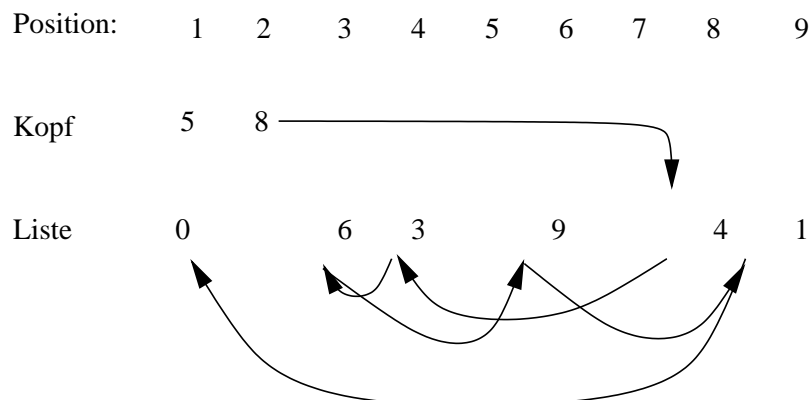
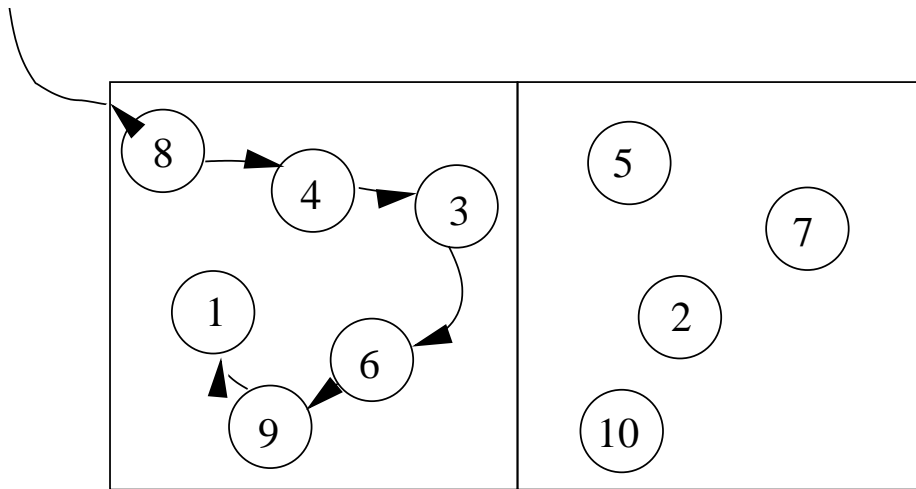
‘Linked lists’ (LL) werden verwendet, um die Teilchen den Zellen zuzuordnen. Für jede Zelle wird eine eigene Liste benötigt. Jede LL braucht einen Zeiger um den ersten Datenpunkt zu erreichen, der Endwert muß



einen speziellen Zeigerwert (z.B. 0) haben.

Sequentielle Behandlung  $\rightarrow$  viel Speicherplatz, da jeder Zelle max. mögliche Teilchenzahl zugeordnet werden muß .

LL kein Problem: Speicherplatz als  $N$  fest und im voraus bekannt.



## 2.10 Numerische Methoden für langreichweitige Potentiale

Nicht nur nächste Nachbarn sondern auch weiter entfernte Teilchen tragen bei!

Direkte Methode:  $N^2$ -Rechenzeit!

Auch mit modernen Rechner nur einige tausend Teilchen möglich!

Alternativen:

- P<sup>3</sup>M ( Particle-Particle Particle-Mesh )
- Hierarchische Treecodes
- Fast Multipole Method

Alle Methoden nutzen die Tatsache, daß weiter entfernte Teilchen weniger zu den Kräften beitragen und daher weniger detaillierte Information darüber notwendig ist.

- Spezielle Hardware (z.B. GRAPE)  
~  $N^2$ , aber einzelne Kraftberechnung sehr schnell.

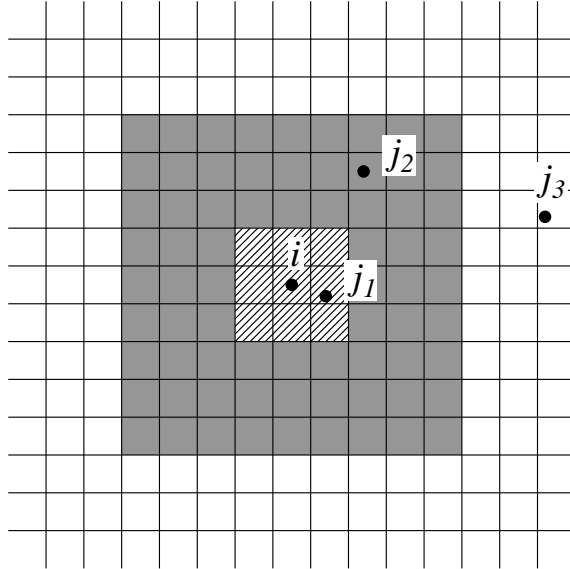
### 2.10.1 P<sup>3</sup>M - Particle-Particle-Particle-Mesh-Code

Hybrid-Code: Eastwood, Hockney (1974,1980)

Besonders geeignet für korrelierte Systeme mit langreichweitigen Kräften

Grundidee:

Aufspaltung der Kraft in kurz- und langreichweitigen Anteil



Kurzreichweitiger Anteil:      Direkte Teilchen-Teilchen-WW  
 Langreichweitiger Anteil:      Gitterberechnung

### Teilchen-Feld-Methoden

Kraft der einzelnen Teilchen wird durch Feld ersetzt, d.h.

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \sum_{\nu} \alpha \frac{\mathbf{r}}{r^3} \text{ wird überführt in } \frac{d^2x}{dt^2} = E(\mathbf{r})$$

wobei  $E(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} E_{\nu} = \sum_{\nu} \alpha \frac{\mathbf{r}}{r^3}$ .

Statt nun ein Vektorfeld auf dem Gitter zu definieren, verwendet man das Potential

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\alpha_2 \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

Das Gesamtpotential ist wieder die Summe der Einzelpotentiale

$$\Phi(x) = \sum \Phi_\nu$$

Die Summe des Gesamtpotentials entspricht dann der Poissongleichung

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho$$

wobei  $\rho$  die Ladungs- oder negative Massendichte ist.

Damit die Feldbeschreibung möglichst genau ist, muß das Gitter fein sein.

- 2 Gitter:
- Potentialgitter (Potential, etc.)
  - Kettengitter
- Zellgröße  $\simeq r_{sr}$  (kurzreichweitige Kraft)
- jede Zelle wird 'linked list' zugeordnet
- wird ähnlich wie kurzreichweitige Kraft behandelt

Teilchendynamik wird durch 'leap-frog'-Methode beschrieben.

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_i^{n+1} &= \mathbf{x}_i^n + \frac{\mathbf{p}_i^{n+1/2}}{m_i} \Delta t \\ \mathbf{p}_i^{n+1/2} &= \mathbf{p}_i^n - 1/2 + (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_i^{sr}) \Delta t\end{aligned}$$

$\mathbf{F}_i$  : PM-Anteil

$\mathbf{F}_i^{sr}$ : PP-Anteil

3 Schritte der Berechnung der Teilchen-Gitter-Kräfte für P<sup>3</sup>M:

1. Dichte(Ladungs-,Massen-) wird angenähert, indem man dem feinen Gitter Ladungen zuordnet.
2. Fast Fouriertransformation wird verwendet, um die Poissonglg. für das Potential der Verteilung auf dem Gitter zu berechnen  
→ Potential an jedem Gitterpunkt
3. Feld an jedem Gitterpunkt wird durch numerisches Differenzieren des Potentials bestimmt. Dann wird die Kraft auf ein Teilchen vom Gitterfeld durch Interpolation berechnet.

Berechnung der Teilchen-Teilchen-Kräfte:

1. Verfahre wie bei kurzreichweitigen Potentialen  
d.h. erstelle 'linked lists'
2. Bestimme Kräfte der nächsten Nachbarn

Rechenzeit im Idealfall  $\simeq O(N)$ , hängt allerdings von der Wahl von  $r_{sr}$  ab.  $r_{sr}$  sollte so möglichst klein sein, allerdings nur begrenzt machbar, da Glättung der Gitterkräfte notwendig.

Vorteile: relative schnell

Nachteile: komplexe Kräfteberechnung

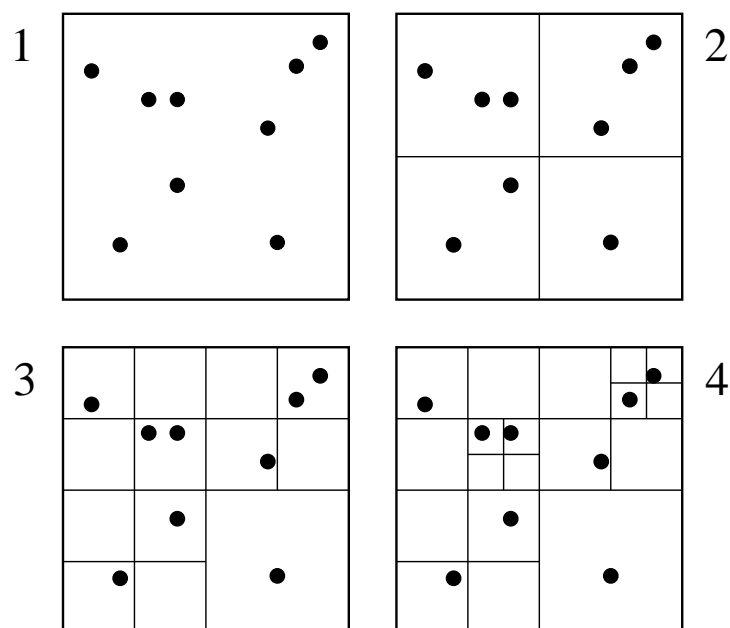
Aufspaltung in 2 Teile kann Probleme bei äußeren Kräften geben

## 2.10.2 Hierarchischer Treecode

Erster Treecode: J.Barnes, P. Hut, Nature **324**, 446 (1986)

Okt - Tree:

Sukzessive Unterteilung bis höchstens 1 Teilchen pro Zelle:



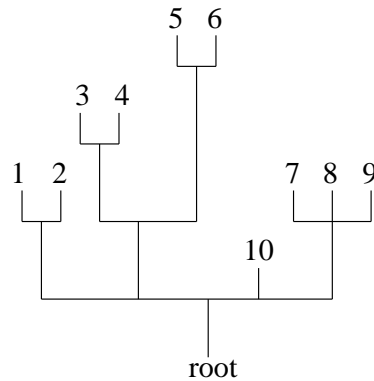
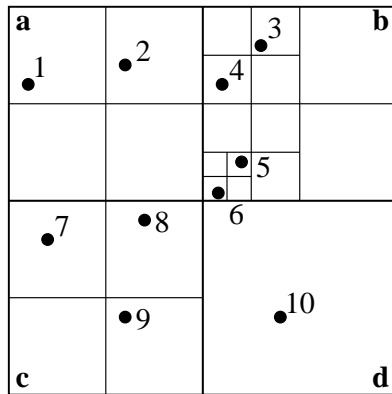
Zelle leer - wird ignoriert

1 Teilchen - wird als Blatt gespeichert

mehrere Teilchen - wird als Verzweigung gespeichert und weiter unterteilt.

Unterteilung wird nicht wie Gitter verwendet, sondern nur um Baumstruktur aufzubauen.

Gespeichert werden muß die Verzweigung, ein Zeiger zu der Tochter bzw. dem Vater, der Level der Aufspaltung.



Wieviele Unterteilungen notwendig bis man ein Blatt erreicht hat?

$$L \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^x = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \rightarrow \left(\frac{1}{N}\right)^{1/3} = \left(\frac{1}{2}\right)^x$$

$$x \sim \log_2 N^{1/3} = \frac{1}{3 \log 2} \log N \sim \log N$$

d.h. Baum bauen  $\sim N \log N$ .

### Kräfteberechnung

Baumstruktur gibt Möglichkeit, nahe und entfernte Teilchen zu unterscheiden, ohne wirklich den Abstand zu berechnen.

nahe Nachbarn:                   spüren Kraft jedes einzelnen Teilchens

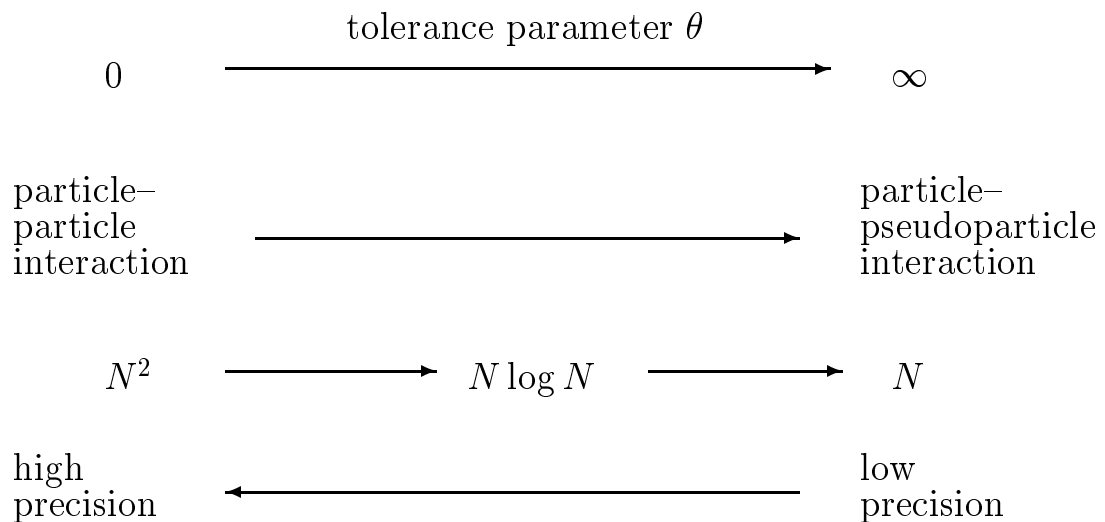
weiter entfernte Teilchen   Wechselwirkung mit Pseudoteilchen

Basis für  $N \log N$  - Abhängigkeit der Rechenzeit

Kriterium:            $s/d < \theta$

wobei  $s$  die Größe der betrachteten Zelle,  $d$  Distanz des Teilchens,  $\theta$  der Tolernanzparameter.

Genauigkeit und Rechenzeit hängen von der Wahl von  $\theta$  ab!



Es hat sich herausgestellt, daß eine Wahl von  $0.1 \leq \theta \leq 1$  am besten geeignet ist.

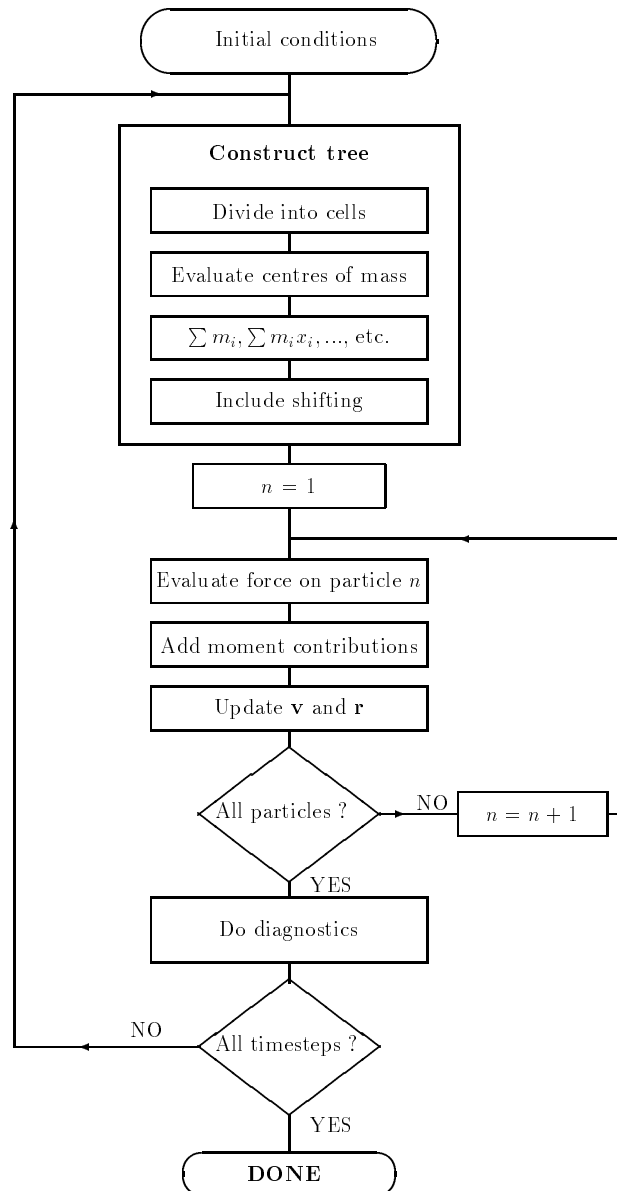
Eine zweite Möglichkeit, die Genauigkeit zu erhöhen, ist die Multipolentwicklung der Pseudoteilchen:

$$\mathbf{F}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_i) \simeq \mathbf{F}(\mathbf{R}) - \mathbf{r}_i \nabla \mathbf{F}(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} r_i r_j \nabla \nabla \mathbf{F}(\mathbf{R}) + \dots$$

- Für Gravitationskräfte nur eine weitere Möglichkeit die Genauigkeit zu erhöhen.
- Für Coulombkräfte wesentlich, da der Fall  $\sum_i q_i = 0$  auftreten kann, d.h. Pseudoteilchen wird nicht berücksichtigt.

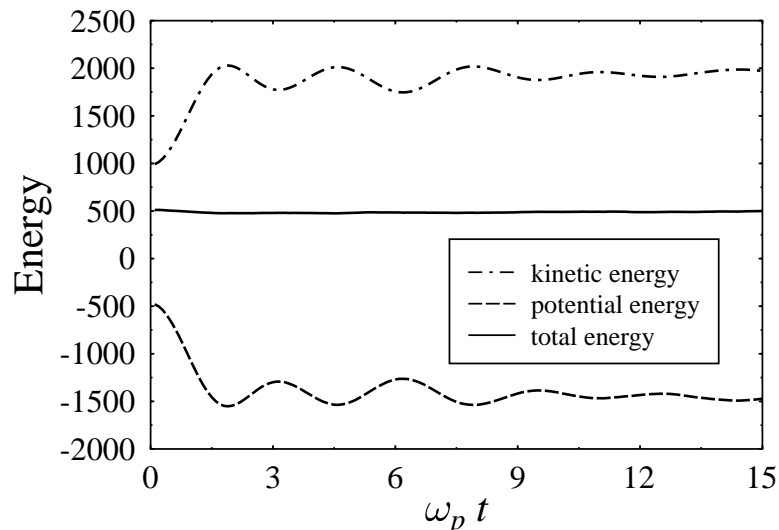


Dynamik:

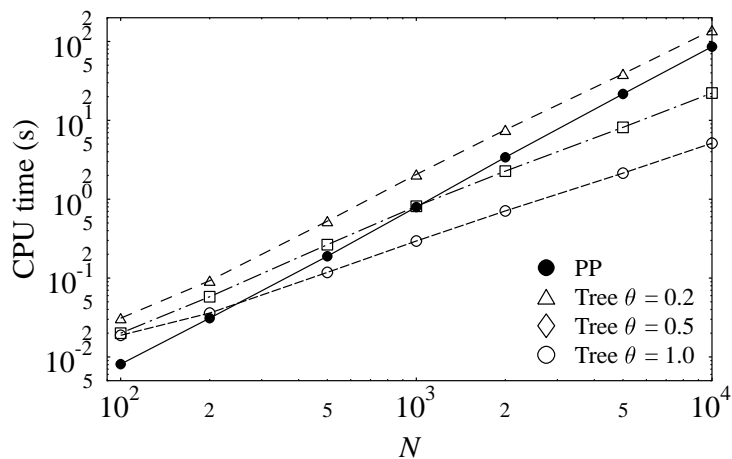


Das heißt, daß die Baumstruktur in jedem Zeitschritt neu berechnet wird. Da aber das Aufstellen der Baumstruktur weniger als 10 beansprucht, fällt dies nicht weiter ins Gewicht.

Energieerhaltung:



Man sieht, daß die Erhaltung selbst für ein System mit nur 1000 Teilchen sehr gut ist. Bei vernünftig gewählten Parametern, ist sie in der Regel besser als 1%.



Treecodes haben bei geringen Teilchenzahlen zunächst einen größeren Overhead als Standard-Teilchen-Codes. Aber bei einigen 100 Teilchen (abhängig von der verwendeten Maschine) wird der Treecode wesentlich effizienter.

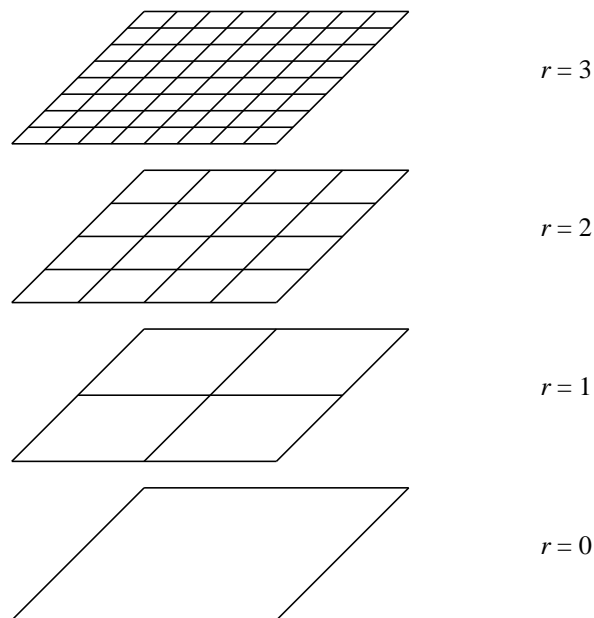
### 2.10.3 Fast Multipole Method - FMM

FMM nutzt die Tatsache, daß die Multipolentwicklung der Ordnung unendlich die gesamte Information des Systems enthält.

nahe Nachbarn:  $\longrightarrow$  direkte Teilchen-Teilchen-WW

weiter entfernte Teilchen:  $\longrightarrow$  getrennt behandelt

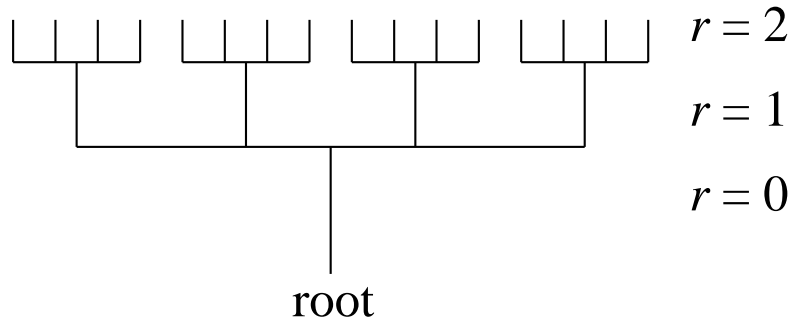
Fernfeld: Multipolentwicklung hoher Ordnung



Unterteilung des Raumes in  $8^r$  Boxen der Seitenlänge  $d/2^r$  ( $r=0,1,2,..$ ) bis zu einer maximalen Verfeinerung  $R$ .

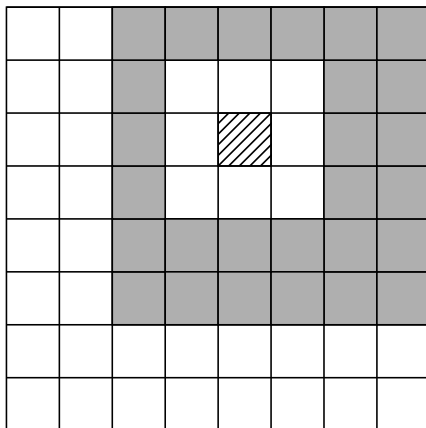
$R$  wird so gewählt, daß Zahl der Boxen  $\sim$  Zahl der Teilchen.

Für jede Box und Überbox wird Multipolentwicklung der Ordnung  $L$  ausgeführt, wobei gilt  $(\sum_i q_i)2^{-L} < \epsilon$ , wobei  $\epsilon$  eine vorgegebene Genauigkeit ist.



Von der Wurzel geht man dann wieder zurück und unterscheidet dabei zwischen

- Nahfeld - direkte Summation
- Interaktivfeld - Taylor-Entwicklung
- Fernfeld - Taylor-Entwicklung



**Vor - und Nachteile gegenüber hierarchischem Treecode:**

- vorgegebene Genauigkeit
- $N$ -Abhängigkeit der Rechenzeit
- größerer Overhead  
erst für  $N \sim 10^6 - 10^7$  schneller

- Einschränkung der Geometrie
- besser für homogene verteilte Systeme
- Hybrid-Tree-FMM ist adaptiv zur Verteilung

Ergänzungen:

Weiterführende Literatur zu

P <sup>3</sup> M:	Hockney, Eastwood, <i>Computer simulation using Particles</i> , Institut of Physics Publ., (1988)
Treecodes	S.Pfalzner, P.Gibbon, <i>Many-body tree methods in Physics</i> , Cambridge University Press, (1996)
FMM	L. Greengard, <i>The numerical solution of the N-body problem</i> , Computers in Physics, Mar./Apr. (1990) 142-152.

## 2.11 Periodische Randbedingungen

Für Systeme bei denen nur ein Ausschnitt aus einem größeren System behandelt wird.

Umgebung einbeziehen, um Oberflächeneffekte zu vermeiden.

Fiktives unendliches System:

Um das kubische Volumen der Kantenlänge  $L$  existieren identische Boxen identischen Inhalts, die durch Verschiebung der ursprünglichen Box um ein Vielfaches von  $L$  erzeugt werden.

WW mit Teilchen  $j$  am Ort  $r_j(x, y, z)$ , aber auch mit dessen Abbildern am Ort  $r_j(x, y + L, z)$  oder z.B.  $r_j(x + L, y - L, z + 2L)$ .

Methode hängt von der Reichweite der Kräfte ab!

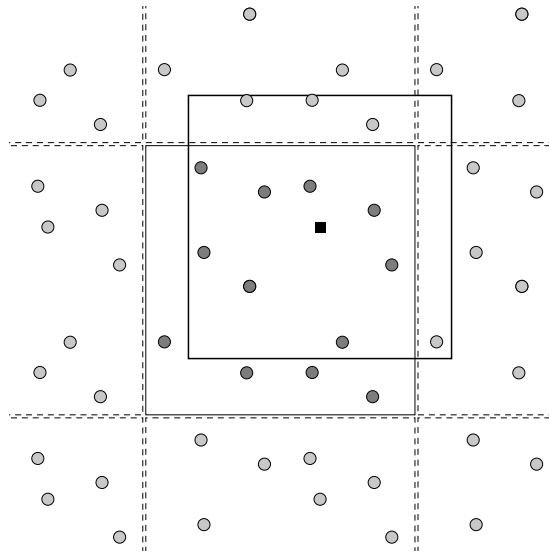
- sehr kurzreichweitig - Saum um Box
- kurzreichweitig - Minimum Image
- langreichweitig - Ewald-Methode

## 2.12 ‘Minimum-Image’-Methode

Wenn  $r_c$  kleiner als  $L/2$ , kann man ‘Minimum-Image’-Methode anwenden.

Für jedes Teilchen zieht man nur  $N - 1$  Teilchen bzw. Abbilder in Betracht, die innerhalb einer gedachten Box der Länge  $L$  liegen, deren Zentrum das betrachtete Teilchen ist.

In die Kräfteberechnung gehen dann für kurzreichweitige Kräfte nur Teilchen mit einem Abstand kleiner als  $r_{cut-off}$  ein.



Die Suche der nächsten Nachbarn erfolgt also für jedes Teilchen mit genau  $N - 1$  Teilchen.

Für jedes Teilchen muß man also die anderen Teilchen in den entsprechenden Boxen aussuchen. Eine Möglichkeit dies ohne 'if'-Abfrage zu gestalten, ist die folgende

$$D = D - L * \text{integer}(D/L),$$

wobei  $D$  die Distanz der betrachteten Teilchen und  $L$  die Länge der Simulationsbox.

### 2.13 Ewald-Methode

Wenn Potential über Entfernung  $L/2$  hinaus noch wirkt, ist 'Minimum-Image'-Methode nicht mehr anwendbar. → dann **Ewald-Methode**.

Referenz: P.P. Ewald, Die Entwicklung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale, Ann. Physik, **64**, 253 (1921)

Ewald-Methode: Berechnung der langreichweitigen Wechselwirkung für ein unendlich ausgedehntes Gitter periodisch fortgesetzter Boxen.

Für ein  $1/r$ -System ist das Potential am Ort eines Teilchens in dimensionslosen Größen gegeben durch ( $q=m$  für Gravitationspotential):

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|},$$

wobei  $\sum_{\mathbf{n}}$  bedeutet, daß über die Box und alle periodischen Fortsetzungen summiert wird und  $\mathbf{n}$  der Verschiebungsvektor ist.

Einführen einer Abschirmfunktion  $\gamma$ , für die gilt:

- für kleine Werte gleich 1
- für größere Werte praktisch gleich 0

Jeder der Summanden wird aufgespalten in

$$\frac{q_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|} = \frac{q_j \gamma(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|} + \frac{q_j (1 - \gamma(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|}$$

Erste Summand trägt nur für  $\mathbf{n}$  bei, langreichweitiger Teil wird als Fourierreihe dargestellt.

Eigenschaften von Fourierreihen:

- Bei räumlich langsam veränderlichen Funktionen approximieren schon wenige Summanden die Funktion gut.
- Fourierreihe für eine in einer kubischen Box definierten Funktion enthält bei formaler Verwendung für Orte außerhalb der Box automatisch die periodische Fortsetzung.

Fehlerfunktion für  $\gamma$ :

$$\gamma(r) = \operatorname{erfc}(\nu r) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_{\nu r}^{\infty} \exp(-\rho^2) d\rho$$



( $\nu$  frei wählbarer Parameter der Reichweite des Abschirmpotentials).

Damit gilt für potentielle Energie  $\Phi_p = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N q_i U(\mathbf{r}_i)$ :

$$\begin{aligned} \Phi_p &= \sum_{\mathbf{n}} \sum_i q_i \frac{\operatorname{erfc}(\alpha r_{\mathbf{n}i})}{r_{\mathbf{n}i}} \\ &+ \frac{1}{\pi L} \sum_i \sum_{\mathbf{h} \neq 0} q_i \exp\left(\frac{-\pi^2 |\mathbf{h}|^2}{\alpha^2 L^2}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L} \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_{oi}\right), \end{aligned} \quad (7)$$

$\mathbf{h}$  ist der reziproke Gittervektor in Integerkomponenten,  $\mathbf{r}_{\mathbf{n}i} = \mathbf{r}_{\mathbf{n}} - \mathbf{r}_i$  und  $\mathbf{r}_{oi} = \mathbf{r}_o - \mathbf{r}_i$ .

Die Kräfte erhält man durch Differentiation der potentiellen Energie:

$$\mathbf{F} = -\frac{d\Phi}{d\mathbf{r}}.$$

d.h.

$$\begin{aligned} F_x^p &= \sum_{\mathbf{n}} \sum_i \frac{q_i \mathbf{x}_{\mathbf{n}i}}{r_{\mathbf{n}i}^3} \left[ \operatorname{erfc}(\alpha r_{\mathbf{n}i}) + \frac{2\alpha r_{\mathbf{n}i}}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha^2 r_{\mathbf{n}i}^2) \right] \\ &+ \frac{2}{L^2} \sum_i \sum_{\mathbf{h} \neq 0} q_i h_x \exp\left(\frac{-\pi^2 h^2}{\alpha^2 L^2}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L} \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_{os}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

### Zusammenfassung: Ewald-Methode

- Coulomb-Kraft wird durch Kraft ersetzt, die die Anteile der periodischen Abbilder enthält.
- Summe über unendliche Reihen von Abbildern wird so umgeschrieben, daß sie schnell konvergiert.
- Beachte: Wenn man Tree-Code für periodische Systeme verwendet, muß man auch eine Multipolentwicklung der Ewaldkräfte vornehmen.

## 2.14 Auswertung der Resultate

### 2.14.1 Erhaltungsgrößen des Systems

Die Bewegungsgleichung von  $N$  Teilchen ist in der Hamiltonschen Form gegeben durch

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}; \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

In einem vollkommen isolierten System sind Energie, Impuls und Drehimpuls erhalten.

Ist  $H$  translationsinvariant in einer Richtung, dann bleibt die Impulskomponente erhalten, ist  $H$  rotationsinvariant in eine Richtung, dann bleibt das entsprechende Drehmoment erhalten.

Beispiele:

- System in sphärischem Behälter, Drehimpulskomponente erhalten, Impuls nicht erhalten
- kubischer Kasten - keine Impulsgröße erhalten
- periodisches System - Impuls erhalten, aber keine Drehimpulserhaltung!
- (leider kein sphärisches periodisches System)

d.h. in MD-Simulationen muß Energie erhalten bleiben, wenn keine explizit zeit- oder geschwindigkeitsabhängigen Kräfte auf das System wirken.

Erster Test, ob Ergebnisse realistisch: **Energieerhaltung**.

Bsp. für Energieerhaltung: **siehe Abb.20**

Kleine Fluktuationen zulässig, aber keine Drifts!

Sonst macht die Simulation keine korrekten Aussagen über das mikrokanonische Ensemble.

Mögliche Ursachen für die Verletzung der Energieerhaltung:

- Zeitschritt zu groß (Aufwärtsdrift)
- Effekt der Potentialabschneidung
- Programmfehler

Schneller Anstieg während der ersten Zeitschritte:

Programmfehler oder Anfangskonfiguration nicht im Gleichgewicht, starke Teilchen-Teilchen-Kräfte.

(Achtung: exzellente Energieerhaltung kann Indiz dafür sein, daß sich Teilchen gar nicht bewegen!)

Verlet-Algorithmus bietet gute Energieerhaltung selbst bei relativ großen Zeitschritten.

### 2.14.2 Statistische Ensemble und Fehlerberechnung

Das betrachtete System wird durch einige wenige Variablen beschrieben (z.B. NVE).

Betrachtet man die makroskopische Variable  $A_{obs}$  ist das Zeitmittel über langen Zeitraum über momentanen Werte der Observablen  $A$  für Zustände  $\Gamma$  im Phasenraum

$$A_{obs} = \langle A \rangle_{Zeit} = \langle A(\Gamma(t)) \rangle_{Zeit} = \lim_{t_{obs} \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{obs}} \int_0^{t_{obs}} A(\Gamma(t)) dt$$

$$A_{obs} = \langle A \rangle_{Zeit} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M A_{\mu}$$

Eigenschaften wie Diffusionskoeffizient, Viskosität  $\nu$  und Strukturfaktor  $S(k)$  sind nur durch Variablen (NVE) bestimmt und momentaner Zustand nicht entscheidend.

### Fehleranalyse

Mögliche Fehler:

- |                 |   |
|-----------------|---|
| systematische:  | Größenabhängigkeit, schlechte Zufallszahlen, kein oder schlechtes Gleichgewicht |
| statistische:   | Länge bzw. Kürze der Simulation   |
| fluktuiierende: | intrinsisch   |

Nur zufällige Fluktuationen können mit Fehleranalyse untersucht werden.

Forderung: Gaußscher Prozeß , d.h.

$$\langle \delta A(t_1) \delta A(t_2) \dots \delta A(t_n) \rangle = 0$$

$$\sum_{\text{Paare}} \langle \delta A(t_i) \delta A(t_j) \rangle \langle \delta A(t_k) \delta A(t_l) \rangle = 0$$

Wenn jede Messung  $A_\mu$  unabhängig ist, mit der Varianz:

$$\sigma^2(A) = \frac{1}{M} \sum_{\mu} (A_\mu - \langle A \rangle)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2,$$

dann gilt für die Varianz des Mittelwertes:  $\sigma^2(\langle A \rangle) = \sigma^2(A)/M$ .

Bei MD sind aber Messungen von aufeinander folgenden Zeitpunkten nicht vollständig unabhängig!  $\rightarrow$  Fehler wird unterschätzt, Anzahl der effektiv unabhängigen Messungen kleiner als  $M$ .

Für diesen Fall gilt für die Varianz:

$$\sigma^2(\langle A \rangle) = \frac{1}{M} \sigma^2(A) \left[ 1 + 2 \sum_{\mu} (1 - \mu/M) \Phi_{\mu} \right],$$

wobei die Autokorrelation:

$$\Phi_{\mu} = \frac{\langle A_{\mu} A_0 \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$$

Zu detaillierter Fehleranalyse müsste man  $\Phi_{\mu}$  genauer untersuchen.

Ausweg: Mittelung über Blöcke aufeinanderfolgender Werte.

Blöcke größer  $\rightarrow$  Korrelation geringer.

Wenn Blocklänge größer als Korrelationslänge  $\rightarrow$  stat. Unabhängigkeit.

Aber: zu lange Blöcke reduziert die Anzahl der Blockmittelwerte  $\rightarrow$  Schätzung der Varianz der Größe wird unzuverlässiger.

Lösung: sukzessive Blockgrößen ( $b=1,2,4,\dots$ ). Für jede Schätzung der Varianz gilt dann:

$$\sigma^2(\langle A \rangle_b) = \frac{1}{M_b - 1} \sum_{\beta=1}^{M_b} (A_\beta^2 - \langle A \rangle_b^2),$$

wobei  $M_b$  Anzahl der Blöcke,  $A_\beta$  typischer Blockwert,  $\langle A \rangle_b$  allgemeines Mittel.

$\sigma^2(\langle A \rangle_b)$  nimmt zu bis zu einem Plateau  $\rightarrow$  das Ergebnis.

## 2.15 Einfache thermodynamische Mittelungen

Wenn Ergodenhypothese zutrifft, ist der Ensemblemittelwert gleich dem zeitlichen Mittelwert und für den Mittelwert einer Simulation ergibt sich

$$\langle A \rangle_{run} = \frac{1}{\tau_{run}} \sum_{\tau=1}^{\tau_{run}} A(\tau).$$

Thermodynamische Eigenschaften des Systems kann man folgendermaßen bestimmen:

kinetische Energie(für atomare Systeme):

$$E_{kin} = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{|p_i|^2}{2m_i} \right\rangle$$

$$E_{pot} = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N V(r_{ij}) \right\rangle$$

entsprechend gilt für die Temperatur:

$$T = \frac{1}{3Nk_B} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{|p_i|^2}{m_i} \right\rangle$$

Beachte: Für molekulare Systeme muß die Schwerpunktschwindigkeit verwendet werden und es ergibt sich ein zusätzlicher Term, der die Winkelgeschwindigkeit enthält.

Aus Virialsatz folgt für den Druck

$$p = \frac{2}{3V} \langle E_{kin} \rangle + \frac{1}{3} \left\langle \sum_{i<j} \mathbf{F}_{ij} \mathbf{r}_{ij} \right\rangle$$

### Strukturfaktor:

Struktur eines Systems ist charakterisiert durch die Verteilungsfkt. der Positionen. Die einfachste Funktion zur Beschreibung ist die Paarkorrelationsfunktion  $g(r)$ . Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Paar mit dem Abstand  $r$  zu finden, relativ zu einem vollständig zufällig verteilten System

Damit gesamte Struktur des Systems festgelegt.

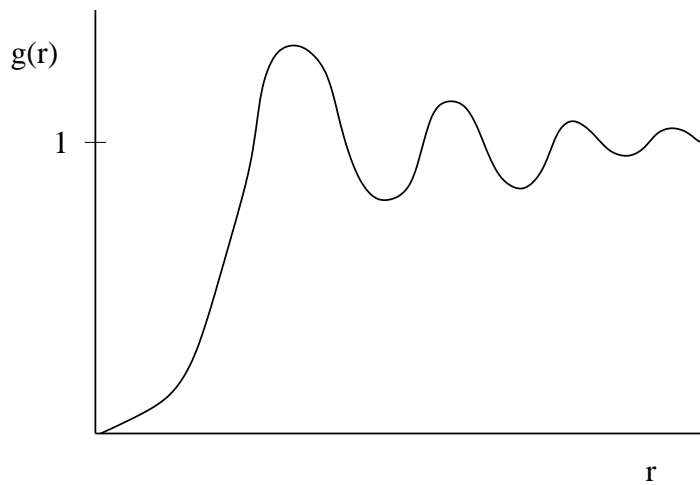
$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\mathbf{N}(\mathbf{N} - 1)}{\rho^2 \mathbf{Z}_{\mathbf{NVT}}} \int \mathbf{dr}_3 \mathbf{dr}_4 \dots \mathbf{dr}_N \exp(-\beta \mathbf{V}(\mathbf{dr}_1, \dots, \mathbf{dr}_N)).$$

Für identische Teilchen gilt

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_i \sum_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}) \right\rangle$$

In der Simulation wird die  $\delta$ -Funktion durch eine Funktion ersetzt, die in einem schmalen Bereich ungleich Null ist.

→ Histogramm für alle Paarabstände.



$g(r)$  kann benutzt werden, um Ensemblemittelwerte zu berechnen:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2} N \rho \int_0^\infty A(r) g(r) 4\pi r^2 dr$$

z.B.

$$E = \frac{3}{2} N_k T + 2\pi N \rho \int_0^\infty r^2 V(r) g(r) dr$$

Strukturfaktor  $S(k)$  ist mit  $g(r)$  durch Fouriertransformation verknüpft:

$$S(k) = 1 + \rho \int g(r) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Für isotrope Systeme:

$$S(k) = 1 + 4\pi\rho \int_0^\infty r^2 \frac{\sin kr}{kr} g(r) dr$$

Wichtig, da direkter Vergleich mit experimentellen Streuexperimenten möglich (Neutronen- und Röntgenstreuung).  $S(k)$  Bindeglied zwischen Simulation und Experiment.



Beispielfilme ( im MPEG-Format ) zu MD- und MC-Simulationen können auf folgenden Interneadressen gefunden werden:

- <http://www-hpcc.astro.washington.edu/simulations/SPH/>
- <http://galileo.gmu.edu/nbody/nbody.html>
- <http://www.npac.syr.edu/EDUCATION/PUB/hpfe/module5/index.html>
- <http://www.ifa.hawaii.edu/faculty/barnes/>
- <http://turbo.che.ncsu.edu/nl44/nl/node28.html>
- <http://cnls-www.lanl.gov/beardm/Gallery/Molecular/E250D0100a.gif>
- <http://lut.ac.uk/departments/ma/Research/MolecularDynamics/index.html>
- <http://www.csc.fi/lul/chem/graphics.html>
- <http://hermes.astro.washington.edu:80/picture.html>

Man kann sie sich entweder direkt dort anschauen oder sie über ftp laden und mit *mpeg filename*

## 3 Hydrodynamik

### 3.1 Einleitung

Wo wird numerische Hydrodynamik verwendet?

- Industrie
  - Entwicklung neuer Produkte
  - PKW, Flugzeuge, Schiffe (z.B. Motoreinspritzvorgang)
  - Vorteil: kann Parameter testen ohne ständig Prototypen zu bauen  
→ Kostenersparnis
- Meteorologie
  - Wettervorhersage Strömungen in Ozeanen
  - Klimamodelle, Ozonströmungen, Turbulenz (Erdinneres)
- Astrophysik
  - Supernovae-Explosionen (Brennfronten, Stoßwellen)
  - Mischprozesse in Sternhüllen (Kernreaktionen)
  - astrophysikalischen Prozesse unter extremen Bedingungen

Vorgehen: Materie wird als Flüssigkeit behandelt.

Flüssigkeit(naive Vortstellung): strukturloses, verformbares, kontinuierliches Medium (Inkompressibilität, Viskosität)

Forderung für Flüssigkeitsbehandlung:

**Betrachtete Längen groß gegen mittlere freie Weglänge.**

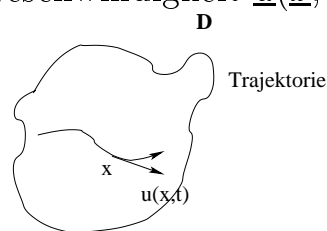
### 3.1.1 Eulergleichungen

#### Kontinuumsapproximation:

3 Grundprinzipien:

- Masse wird weder vernichtet noch erzeugt
- Impulsänderung nur durch äußere Kräfte
- Energie weder vernichtet noch erzeugt

Betrachte kontinuierliches Medium in 3 Dimensionen mit Massendichte  $\rho(\underline{x}, t)$  und Geschwindigkeit  $\underline{u}(\underline{x}, t)$ .



Sei D Bereich im 3 dimensionalen Raum und W ein Unterbereich, dann ist die Masse m in W

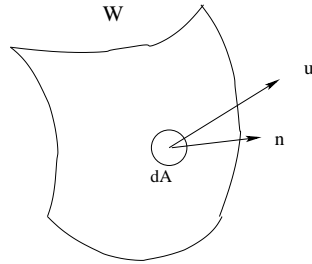
$$m(W, t) = \int_W \rho(\underline{x}, t) dV(\underline{x}) \quad (9)$$

wobei  $\rho(\underline{x}, t)$  und  $\underline{u}(\underline{x}, t)$  glatte Funktionen seien (differenzierbar). Für ein Flüssigkeitselement bedeutet dies, daß man die molekulare Struktur der Materie vernachlässigt.

#### Massenerhaltung

W sei fest in der Zeit

$$\frac{d}{dt}m(W, t) = \frac{d}{dt} \int_W \rho(\underline{x}, t) dV(\underline{x}) = \int_W \frac{d\rho(\underline{x}, t)}{dt} dV(\underline{x}) \quad (10)$$



Dies entspricht der Rate der Massenänderung in  $W$ .

Sei  $\partial W$  der Rand von  $W$  (glatt) und  $\underline{n}$  der auswärtsgerichtete Normalenvektor an der Oberfläche mit dem Oberflächenelement  $\partial A$ , dann ist der Massenfluß durch  $\partial W$

$$\rho \underline{u} \cdot \underline{n} \quad (\text{nach außen})$$

d.h.

$$\frac{d}{dt} \int_W \rho dV = - \int_{\partial W} \rho \underline{u} \cdot \underline{n} dA \quad (11)$$

Massenänderung in  $W =$  Rate, mit der Masse nach  $W$  durch  $\partial W$  hin- eintransportiert wird.

Integralform der Massenverteilung :

Gauß'scher Satz :  $\int \underline{f} \cdot \underline{A} = \int \nabla \cdot \underline{f} dV$

$$\longrightarrow \int_W \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) \right] dV = 0$$

für beliebige  $W$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) = 0 \quad (12)$$

Dies stellt die Kontinuitätsgleichung dar und ist die differentielle Form der Massenerhaltung.

## Impulserhaltung

Sei  $\underline{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$ ,

dann  $\underline{u}(\underline{x}, t) = d\underline{x}(t)/dt = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))$ ,

(Bem.: Gilt in kartesischen Koordinaten, vorsichtig bei krummlinigen Koordinaten)

Wenn  $a$  die Beschleunigung und  $u$  die Geschwindigkeit ist, dann gilt

$$\underline{a}(\underline{x}, t) = \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} = \frac{D \underline{u}}{Dt}$$

Definition:  $\frac{D}{Dt} = \partial_t + \underline{u} \cdot \nabla$

Dies berücksichtigt die Bewegung der Flüssigkeit.

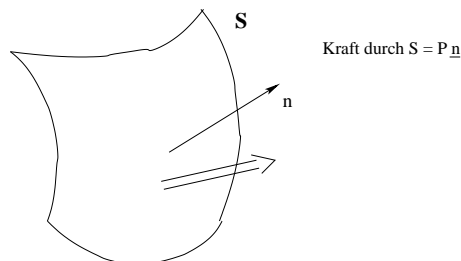
allgemein:

$$\frac{df(x_1(t), x_2(t), x_3(t))}{dt} = \partial_t f + \underline{u} \cdot \nabla f = \frac{Df}{Dt}$$

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \underline{u} = 0 \quad (13)$$

## Druck



wirkt senkrecht zur Oberfläche.

Kraft pro Einheitsfläche in Richtung  $\underline{n} = P(\underline{x}, t) \underline{n}$

Keine Tangentialkräfte/Spannungen (siehe Viskosität ...)

Ideale Flüssigkeit.

$$\underline{S}_{\partial W} = \text{Kraft auf } W = - \int_{\partial W} P(\underline{x}, t) \underline{n} dA$$

(negativ da  $\underline{n}$  nach außen.

$$\underline{S}_{\partial W} = \text{Kraft auf } W = - \int_W \underline{\nabla} P dV$$

## Externe Kräfte

$$\underline{K}_W = \int_W \rho \underline{f} dV$$

$\underline{f}$  externe Kräfte pro Einheitsmasse (Gravitation, Magnetfeld, Corioliskraft)

→ Kraft pro Volumen =  $-\text{grad } p + \rho \underline{f}$

Newton (2. Gesetz) (Kraft = Masse  $\times$  Beschleunigung)

$$\rho \frac{D\underline{u}}{Dt} = -\text{grad } p + \rho \underline{f} \quad (14)$$

Differentielle Form der Impulserhaltung

Nun zum integralen Implussatz:

Sei  $\underline{\Phi}(\underline{x}, t)$  Trajektorie eines Teilchens, das bei  $t = 0$  am Punkt  $\underline{x}$  ist.

D.h. Abbildung  $\underline{\Phi}_t : \underline{x} \rightarrow \underline{\Phi}(\underline{x}, t)$  bewegt Teilchen von  $\underline{x}(t = 0)$  nach neuer Position  $\underline{\Phi}$  zur Zeit  $t$ .

$\underline{\Phi}_t(W)$  ist dann das mitbewegte Volumen.

Betrachte Massenerhaltung in bewegtem Volumen :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \int_{W_t} \rho dV &= \frac{\partial}{\partial t} \int_W \rho \cdot (\Phi(\underline{x}, t)) J(\underline{x}, t) dV \\
&= \int_W \frac{\partial \rho}{\partial t} (\Phi(\underline{x}, t)) J(\underline{x}, t) dV + \int_W \rho J \operatorname{div} \underline{u} dV \\
&= \int_W \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} \underline{u} \right) J dV = 0 \\
&= \int_W \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \underline{u}) \right) J dV = 0 \\
&= \int_{W_t} \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \underline{u}) \right) dV \tag{15}
\end{aligned}$$

für beliebige  $W$  und  $W_t$ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \underline{u}) = 0 \tag{16}$$

Wichtig:

$$\frac{\partial f}{\partial t} (\Phi(\underline{x}, t)) = \left( \frac{Df}{Dt} \right) (\Phi(\underline{x}, t))$$

$\frac{D}{Dt}$  ist Ableitung entlang Flüssigkeit.

$$\frac{\partial J}{\partial t} = J(\underline{x}, t) \operatorname{div} \underline{u}(\Phi(\underline{x}, t))$$

$$\frac{\partial (\Phi(\underline{x}, t))}{\partial t} = \underline{u}(\Phi(\underline{x}, t))$$

Jetzt Impulserhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{W_t} \rho \underline{u} dV = \underline{S}_{\partial W_t} + \int \rho \underline{f} dV$$

linke Seite

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial}{\partial t} \int_W \rho \underline{u}(\Phi(\underline{x}, t)) J(\underline{x}, t) dV = \int_W \left( \frac{D(\rho \underline{u})}{Dt} + (\rho \operatorname{div} \underline{u}) \right) J dV \\ &= \int_{W_t} \left( \frac{D(\rho \underline{u})}{Dt} + (\rho \operatorname{div} \underline{u}) \right) dV \end{aligned}$$

rechte Seite

$$\begin{aligned} &= \int_{W_t} -\underline{\nabla} P dV + \int \rho \underline{f} dV \\ &= \int_{W_t} (-\underline{\nabla} P dV + \rho \underline{f}) dV \end{aligned} \tag{17}$$

Zusammenfassend ergibt sich mit der Kontinuitätsgleichung

$$\rho \frac{D\underline{u}}{Dt} = -\underline{\nabla} P + \rho \underline{f}$$

Allgemein gilt:

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho g dV = \int_{W_t} \frac{Dg}{Dt} dV$$

Transporttheorem

### Inkompressibilität

Volumen  $(W_t) = \int_{W_t} dV = \text{const.}$

$$\begin{aligned} \longrightarrow 0 &= \frac{d}{dt} \int_{W_t} dV = \frac{d}{dt} \int_W J dV \\ &= \int_W \operatorname{div} \underline{u} J dV = \int_{W_t} \operatorname{div} \underline{u} dV \end{aligned}$$

$\longrightarrow$  Flüssigkeit ist inkompressibel genau dann, wenn  $\operatorname{div} \underline{u} = 0$  bzw.  $J=1$ .



Aus Kontinuitätsgleichung:

Inkompressibilität entspricht  $\frac{D\rho}{Dt} = 0$ .

d.h. die Massendichte ist konstant bei Bewegung

Falls  $\rho = \text{const.} \rightarrow$  Flüssigkeit homogen.

## Energiegleichung

1. Hauptsatz der Thermodynamik:

$$\begin{aligned} dU &= TdS - pdV \\ \rightarrow T \frac{dS}{dt} &= \frac{dU}{dt} + P \frac{dV}{dt} \end{aligned}$$

adiabatisch, keine Energiequellen oder dissipativen Vorgänge  $TdS = 0$ .

Unter Verwendung der Beziehung

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt}$$

erhält man

$$\frac{dU}{dt} = -P \frac{dV}{dt} = PV \operatorname{div} \underline{u}$$

Nun gilt aber,

$$U = \epsilon \rho V$$

d.h.

$$\frac{dU}{dt} = \epsilon V \frac{d\rho}{dt} + \epsilon \rho \frac{dV}{dt} + \rho V \frac{d\epsilon}{dt} = \rho V \frac{d\epsilon}{dt}$$

$$\rightarrow \rho \frac{d\epsilon}{dt} = -P \operatorname{div} \underline{u} \quad (18)$$

Kann man umschreiben zu:

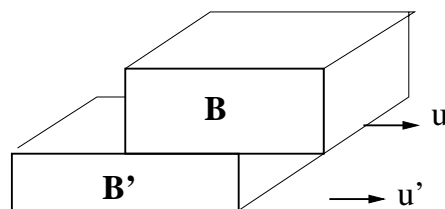
$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \epsilon \underline{u}) = -P \operatorname{div} \underline{u} \quad (19)$$

Zusammenfassung Eulergleichungen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\nabla}(\rho \underline{u}) &= 0 \\
 \frac{\partial(\rho \underline{u})}{\partial t} + \underline{\nabla}(\rho \underline{u} \underline{u}) &= -\underline{\nabla}P + \rho \underline{f} \\
 \frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \underline{\nabla}(\rho \epsilon \underline{u}) &= -P \underline{\nabla} \underline{u} \rho
 \end{aligned} \tag{20}$$

### 3.1.2 Navier-Stokes-Gleichung

Bisher: Kräfte normal zu Oberfläche.



Betrachte zwei Volumen B und B', die sich mit  $\underline{u}$  und  $\underline{u}'$  bewegen ( $\underline{u} \neq \underline{u}'$ ).

Teilchen bewegen sich von B nach B' und umgekehrt und transportieren dabei Impuls.

d.h. Kraft auf Fläche S pro Flächeneinheit =  $P(\underline{x}, t)\underline{n} + \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t)\underline{n}$ .

$\underline{\underline{\sigma}}$  ist Matrix- **Tensor**.

$\underline{\underline{\sigma}}\underline{n}$  nicht unbedingt parallel zu  $\underline{n}$ , aber möglicherweise einzelne Komponenten.

Anwendung von Newton ergibt:

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho \underline{u} dV = - \int_{\partial W_t} (P(\underline{x}, t)\underline{n} + \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t)\underline{n}) dA$$

Eigenschaften von  $\underline{\underline{\sigma}}$ :

- $\underline{\underline{\sigma}}$  hängt nur von Geschwindigkeitsgradienten ab (linear)
- $\underline{\underline{\sigma}}$  invariant unter Translation und starrer Rotation, d.h., wenn  $\underline{\underline{c}}$  orthogonale Matrix ist, dann  $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{c}} \cdot \underline{\underline{\nabla u}} \underline{\underline{c}}^{-1}) = \underline{\underline{c}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\nabla u}}) \underline{\underline{c}}^{-1}$   
Dies bedeutet kein Impulstransfer bei starrer Rotation.
- $\underline{\underline{\sigma}}$  ist symmetrisch.  
(aus Drehimpulsleichgewicht)

→  $\underline{\underline{\sigma}}$  hängt von symmetrischen Teil von  $\underline{\underline{D}}u$  ab, wobei  $\underline{\underline{D}}$  der Deformationstensor ist.

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Schließlich:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}} &= 2\mu \left[ \underline{\underline{D}} - \frac{1}{3}(\underline{\underline{\nabla u}})\underline{\underline{I}} \right] + \chi(\underline{\underline{\nabla u}})\underline{\underline{I}} \\ &= 2\mu [\underline{\underline{D}} + \lambda \underline{\underline{\nabla u}}\underline{\underline{I}}] \end{aligned}$$

wobei  $\underline{\underline{I}}$  der Einheitstensor,  $\mu$  die dynamische Viskosität,  $\chi$  die Volumenviskosität und  $\chi = \lambda + 1/3\mu$  ist.

Die Navier-Stokes-Gleichung ist dann gegeben durch

$$\frac{\partial(\rho \underline{u})}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}}(\rho \underline{u} \underline{u}) = -\underline{\underline{\nabla}}P + \rho \underline{f} + \underline{\underline{\nabla}}\underline{\underline{\sigma}} \quad (21)$$

Falls  $\mu, \lambda = \text{constant}$ , ergibt sich

$$\rho \frac{\partial(\underline{u})}{\partial t} = -\underline{\underline{\nabla}}P + \rho \underline{f} + (\mu + \lambda)\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{\nabla}}u) + \mu \Delta \underline{u}$$

wobei

$$\Delta \underline{u} = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \underline{u} \quad \text{Laplace-Operator}$$

Falls die Strömung homogene und inkompressibel ist, vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\frac{\partial(\underline{u})}{\partial t} = -\underline{\nabla} P' + \nu \Delta \underline{u}$$

wobei  $\underline{\nabla} \underline{u} = 0$ ,  $\nu = \mu/\rho_0$  und  $P' = P/\rho_0$ .

### 3.2 Klassifikation partieller Differentialgleichungen

Die meisten partiellen Differentialgleichungen sind von 3 Grundtypen: elliptisch, hyperbolisch, parabolisch

Hier betrachten wir nur Dgls. 2. Ordnung.

$$LU = a(x, y)u_{xx} + b(x, y)u_{xy} + c(x, y)u_{yy} = f(u, u_x, u_y, x, y) \quad (22)$$

Bemerkungen:

- Gl.(22) ist linear in den höchsten Ableitungen, d.h.  $a$ ,  $b$ ,  $c$  sind keine Funktionen von  $u$ ,  $u_x$ ,  $u_y$
- Eine Koordinate kann auch die Zeit sein

Betrachte quadratische Form:

$$\begin{aligned} Q(x, y) &= ax^2 + 2bxy + cy^2 \\ &= \underline{x}^t \underline{A} \underline{x} \end{aligned}$$

$$\text{wobei } \underline{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad x^t = (x, y), \quad A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$$

$Q(x, y) = \text{const.} = R$  beschreibt dann entweder eine Ellipse, Hyperbel oder Parabel je nach den Koeffizienten  $a, b, c$ .

Definition: Die korrespondierende Dgl. heißt dann also

elliptisch  $b^2 - ac < 0$

hyperbolisch  $b^2 - ac > 0$

parabolisch  $b^2 - ac = 0$

Durch geeignete Transformation  $\chi = \chi(x, y)$  und  $\nu = \nu(x, y)$  kann man die Dgl. auf Normalform bringen. (Entspricht der Diagonalisierung der quadratischen Form).

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{T}}^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{T}} \quad (23)$$

wobei wie oben definiert ist und für die Eigenwerte die Determinante

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ b & c - \lambda \end{vmatrix}$$

null sein muss. Daher gilt,

$$\lambda_{1,2} = \frac{a + c}{2} \pm \sqrt{(a + c)^2 - 4(ac - b^2)}$$

## Normalform

A) Hyperbolisch

$$u_{\chi\nu} = f(u, u_\chi, u_\nu, \chi, \nu)$$

oder mit weiterer Transformation  $\alpha = \nu - \chi$  und  $\beta = \nu + \chi$

$$u_{\alpha\alpha} = f(u, u_\alpha, u_\beta, \alpha, \beta)$$

Beispiel: Wellengleichung

$$u_{xx} + u_{yy} - \frac{1}{c^2}u_{tt} = 0$$

B) elliptisch

$$u_{\chi\chi} + u_{\nu\nu} = f$$

$$u_{xx} + u_{yy} = 0$$

Laplace-Gleichung - allgemeine Potentialgleichung

z.B. allgemeine stationäre Lösung der Diffusionsgleichung

C) Parabolisch :  $u_{\chi\chi} = f$

$$u_t = \kappa(u_{xx} + u_{yy})$$

Wärmeleitung, Diffusionsproblem

## Charakteristiken

Frage: Unter welchen Bedingungen ist die Kenntnis von  $u, u_x, u_y$  auf einer Kurve  $\Gamma$  ausreichend, zur eindeutigen Berechnung von  $u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}$ , so daß Glg. (22) erfüllt ist?

Falls die Ableitungen

$$du_x = u_{xx}dx + u_{xy}dy$$

$$du_y = u_{xy}dx + u_{yy}dy$$

existieren ergibt sich

$$\begin{pmatrix} a & 2b & c \\ dx & dy & 0 \\ 0 & dx & dy \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{xx} \\ u_{xy} \\ u_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ du_x \\ du_y \end{pmatrix}$$

Diese Glg. hat eine eindeutige Lösung für  $u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}$ , falls die Determinante der Koeffizientenmatrix nicht verschwindet.

$$ady^2 - 2bxdy + cdx^2 \neq 0$$

Falls diese bedingung erfüllt ist, dann existieren die ableitungen und die Lösung kann in den Nachbarnpunkten von  $\Gamma$  berechnet werden.

Multiplikation mit  $1/dx^2$  ergibt

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{a} \left[ b \pm \sqrt{b^2 - ac} \right]$$

$$a \frac{dy^2}{dx^2} - 2b \frac{dy}{dx} + c = 0$$

Dies ist die Charakteristikengleichung. Damit erhält man

hyperbolisch	zwei Charakteristiken
elliptisch	keine Charakteristik
parabolisch	eine Charakteristik

Beispiel: lineare Wellengleichung

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0$$

$$dx^2 - c^2 dt^2 = 0$$

$$x + ct = \text{const.}$$

Lösung konstant auf Geraden.

Bemerkungen:

- Anfängliche Diskontinuität breitet sich entlang der Charakteristiken aus. (Schockwellen)
- Lösung von parabolischen und elliptischen Gleichungen sind immer analytisch, auch bei diskontinuierlichen Anfangsbedingungen
- Falls die Kurve  $\Gamma$  auf der die Daten  $u, u_x, u_y$  gegeben sind eine Charakteristik ist, dann hat die Glg.22 keine Lösung.
- Unterscheidung parabolisch-hyperbolisch nicht so entscheidend:  
in Hydrodynamik: Mischtypen  
 $u_t + uu_x = \alpha u_{xx}$
- Wichtige Unterscheidung: Anfangswertproblem oder Randwertproblem



- Es ist i.a. nicht möglich, elliptische Glg. stabil von den Rändern zu integrieren.

## Zusammenfassung

	Hyperbolisch	Parabolisch	Elliptisch
Koeffizienten	$b^2 > ac$	$b^2 = ac$	$b^2 < ac$
Charakteristiken	2 reelle	1 reelle	2 komplexe
Randbedingung	Cauchy	Neumann	Neumann
	Anfangswert	Dirichlet	Dirichlet
Rand	offen	offen	geschlossen
Typ	Wellen - ausbreitung	Diffusion irreversibel	Keine Wellenbewegung

### 3.3 Hydrodynamische Gleichungen

Die partiellen Differentialgleichungen der Hydrodynamik in einer räumlichen Dimension in ebener Geometrie sind

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho v)}{\partial x} \quad (24)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho v^2)}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (25)$$

$$\frac{\partial(\epsilon)}{\partial t} = -\frac{\partial(\epsilon v)}{\partial x} - \left(\frac{P}{\rho} - \epsilon\right) \frac{\partial v}{\partial x} \quad (26)$$

Bevor man diese Gleichungen numerisch löst, muß das System von kontinuierlichen Gleichungen auf einem Gitter  $(x,t)$  diskretisiert wer-

den.

Partielle Differentialgleichung  $\longrightarrow$  Finite Differenzengleichung

- nicht eindeutig
- Ursache für Abschneidefehler
- Suche Glg., die Fehler minimieren, stabil und konsistent sind

Finite Differenzen: Gitter wird eingeführt.

Nebenbemerkungen zur Nomenklatur:

Definition von Variablen an Mittelpunkten, Rändern und Ecken.

Zunächst 1-dimensional:

Variablen an Rändern sind ganzzahlig, in der Mitte halbzahlig.

Index unten bedeutet räumliche Diskretisierung, Index oben die zeitliche Diskretisierung.

$$\text{Beispiel: } \rho(x_{i+1/2}, t^{n+1}) = \rho_{i+1/2}^{n+1}$$

$$x_i = \sum_{l=0}^{i-1}, \quad t^n = \sum_{l=0}^{n-1} \Delta t^{l+1/2}$$

### 3.4 Taylor-Entwicklung und Fehler in der Ortsvariablen

Jede diskrete Darstellung kontinuierlicher Funktionen erfordert die Darstellung der zeitlichen und räumlichen Ableitungen in den Gleichungen 24 bis 26 auf dem Gitter. Die Dichtegleichung 25 kann folgendermaßen umgeschrieben werden

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad (27)$$

wobei  $F = \rho v$  der Massenfluß ist.

Anmerkung: In einer Dimension ist die Einheit für  $\rho$  Masse/Länge und für  $F$  Masse/Zeit.

Aus dem Erhaltungssatz für die Gesamtmasse erhält man durch Integration von Gleichung 27 über den gesamten Bereich

$$\frac{dM}{dt} = \int_{x_1}^{x_N} \frac{\partial \rho}{\partial t} dx = - \int_{x_1}^{x_N} \frac{\partial F}{\partial x} dx = - [F(x_N) - F(x_1)]. \quad (28)$$

Wir behandeln zunächst die räumliche Ableitung. Wir werden dazu die zeitliche Entwicklung von  $\rho_i$  betrachten, d.h.  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  an der Stelle  $x_i$  und bezeichnen dies als  $(\frac{\partial \rho}{\partial t})_i$ . Um  $(\frac{\partial \rho}{\partial t})_i$  zu berechnen, benötigt man  $(\frac{\partial F}{\partial x})_i$ . Für die Taylor-Entwicklung auf dem diskreten Gitter erhält man

$$F_{i+1} = F_i + \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_i \Delta x_i + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right)_i (\Delta x_i)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}\right)_i (\Delta x_i)^3 + O((\Delta x)^4) \quad (29)$$

wobei  $\Delta x = x_{i+1} - x_i$ . Unter der Annahme, daß das Gitter uniform ist, d.h.  $\Delta x = \text{const}$ , kann man folgendermaßen vorgehen:

Auflösen nach  $(\partial F/\partial x)_i$  ergibt die diskrete Funktion für die erste räumliche Ableitung

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_i = \frac{F_{i+1} - F_i}{\Delta x} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right)_i \Delta x + O((\Delta x)^2) \quad (30)$$

d.h. eine Finite Differenzgleichung erster Ordnung. Der Fehler ist ebenfalls erster Ordnung, d.h. für  $\Delta x \rightarrow 0$  verschwindet der Fehler der zweiten Ableitung nahezu linear mit  $\Delta x$ .

Andererseits gilt auch:

$$F_{i-1} = F_i - \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right)_i (\Delta x)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}\right)_i (\Delta x)^3 + O((\Delta x)^4). \quad (31)$$

Wenn man nun Gleichung 29 von Glg.31 subtrahiert, erhält man für die Differenz

$$F_{i+1} - F_{i-1} = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_i 2\Delta x + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}\right)_i (\Delta x)^3 + O((\Delta x)^5).$$

Auflösen nach  $(\partial F/\partial x)_i$  ergibt dann

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_i = \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 F}{\partial x^3}\right)_i (\Delta x)^2 + O((\Delta x)^4), \quad (32)$$

welches eine finite Differenzendarstellung der räumlichen Ableitung zweiter Ordnung ist. Diesmal verschwindet der Fehler quadratisch mit  $\Delta x \rightarrow 0$ .

### 3.5 Erhaltungsgrößen

Bevor die Diskretisierung der hydrodynamischen Gleichungen in der Zeit durchgeführt wird, soll zunächst auf einen wichtigen Aspekt der räumlichen Ableitungen eingegangen werden, nämlich ihre Erhaltungseigenschaften.

Es wurde gezeigt, daß für die Dichteglg. gilt:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_i = -\frac{F_{i+1} - F_i}{\Delta x} \quad (33)$$

Natürlich sollte bei dieser Finite Differenzengleichung (wie auch bei den übrigen hydrodynamischen Gleichungen) die Gesamtmasse auf dem Gitter erhalten bleiben:

$$M = \sum_{i=1}^N \rho_i \Delta x, \quad (34)$$

wobei hier  $N$  die Anzahl der Gitterpunkte ist. Für  $dM/dt$  gilt dann

$$\frac{dM}{dt} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_i \Delta x \quad (35)$$

Wenn man nun Glg.30 für  $\left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_i$  einsetzt, erhält man

$$\frac{dM}{dt} = - \sum_{i=1}^N (F_{i+1} - F_i) = F_1 - F_{N+1} \quad (36)$$

Das heißt, die zeitliche Änderung der Masse auf dem Gitter resultiert aus dem Massefluß an den Gittergrenzen. Dies sollte offensichtlich auch so sein. Daher ist die räumliche Finite Differenzendarstellung der Dichtegleichung massenerhaltend und erfüllt damit die geforderte Eigenschaft.

### 3.6 Taylorentwicklung und zeitlicher Fehler

Um eine komplette Finite Differenzendarstellung der Dichtegleichung (oder jeder anderen Gleichung) zu erreichen, muß zusätzlich zur räumlichen auch noch eine stabile zeitliche Entwicklung durchgeführt werden. Dies ist etwas kritischer und ist aus der Stabilität einer finite Differenzenbehandlung zu verstehen.

Wenn man eine Taylorentwicklung in der Zeit durchführt, erhält man für die Dichte zum Zeitpunkt  $n + 1$  (beachte  $n$  ist Index)

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^n \Delta t + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} \right)^n (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \left( \frac{\partial^3 \rho}{\partial t^3} \right)^n (\Delta t)^3 + \quad (37)$$

wobei  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  ist. Außerdem gilt unter der Annahme  $\Delta t = t^{n+1} - t^n = t^n - t^{n-1}$

$$\rho_{i-1} = \rho_i - \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}\right)_i \Delta x + \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3}\right)_i \Delta x + \dots \quad (38)$$

Wenn man Glg.37 von Glg. 38 subtrahiert, erhält man

$$\rho_{i+1} - \rho_{i-1} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_i 2\Delta x + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3}\right)_i \Delta x + \dots \quad (39)$$

Durch umstellen ergibt sich

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_i = \frac{\rho_{i+1} - \rho_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3}\right)_i (\Delta x)^2 + \dots \quad (40)$$

welches die zweite Ordnung der diskrete Darstellung der Ableitung repräsentiert.

Es genügt nicht den Abschneidefehler eines finite Differenzalgorithmus zu untersuchen, sondern es ist entscheidend auch die Stabilität der Methode zu untersuchen. Zunächst wollen wir die sogenannte “forward-time, centered space”-Methode betrachten (FTCS). Für die Dichtegleichung erhält man

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} = \frac{F_{i+1}^n - F_{i-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta t, (\Delta x)^2) \quad (41)$$

Weil die Differenzenbildung nicht zentriert in  $t$  ist, ist dieses Schema nur in erster Ordnung zu der Zeit, aber zu der zweiten Ordnung im Raum genau.

Das **Stabilitätskriterium** des finite Differenzschemas definieren wir folgendermaßen: Das System ist stabil, wenn keine einzelne aller

Fouriermode der Lösung unbeschränkt wächst. Dieses Kriterium wurde von von Neumann eingeführt, ist jedoch nur eine von vielen Definitionen für die Stabilität. Allerdings ist das von Neumann Kriterium weitverbreitet in der wegen seiner Anschaulichkeit und der Einfachheit der Implementierung.

Eine einzelne Fouriermode unserer Lösung sei gegeben

$$\rho_j^n = \underline{\rho}^n(k) e^{ik(j\Delta x)}. \quad (42)$$

wobei  $i^2 = -1$ ,  $j$  ist der der Zonenindex,  $\Delta x$  die diskrete Koordinate an deren Stelle die Dichte berechnet wird. Wenn man nun dies in Glg. 41 einsetzt, ergibt sich

$$(\underline{\rho}_i^{n+1} - \underline{\rho}_i^n) e^{ik(j\Delta x)} = -\frac{v\Delta t}{2\Delta x} \underline{\rho}^n (e^{ik(j+1)\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x}) \quad (43)$$

wobei angenommen wurde, daß über das gesamte Gitter  $v = \text{const.}$  Wenn man nun  $\underline{\rho}^{n+1}$  in Termen von  $\underline{\rho}^n$  löst, erhält man

$$\underline{\rho}_i^{n+1} = \left(1 - \frac{iv\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right) \underline{\rho}^n \quad (44)$$

Man sieht, daß jede Fouriermode ungebunden wächst, falls der Koeffizient  $\underline{\rho}^n$  in Glg. 44 größer als 1 wird. In unserem Fall erhalten wir

$$G = \sqrt{1 + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right)^2} \quad (45)$$

was für jedes gegebene  $v$  und  $x$  zu jeder Zeit immer größer als eins ist. Das FTCS Schema ist also unter allen Bedingungen instabil. An diesem Beispiel sieht man, dass es wesentlich ist immer die Stabilität des verwendeten Verfahrens zu prüfen.

Neben der FTCS Methode gibt es allerdings auch ein Schema, dessen Darstellung der Dichte auch einen Fehler der Ordnung  $O(\Delta t, (\Delta x)^2)$

hat, das aber ohne Einschränkungen stabil ist. Diese Methode verwendet sogenanntes “implizites Differenzieren”. Diese Verfahren erhält man folgendermaßen:

Man schreibt die finite Differenzengleichung in der Form

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} = -\frac{F_{i+1}^{n+1} - F_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \quad (46)$$

d.h. der Fluß wird jetzt an der Stelle  $t = t^{n+1}$  anstelle von  $t = t^n$  berechnet. Für die Stabilitätsanalyse ergibt sich dann, wenn wir Glg. 42 in Glg.46 einsetzen

$$(\underline{\rho}^{n+1} - \underline{\rho}^n) e^{ik(j\Delta x)} = -\frac{v\Delta t}{2\Delta x} \underline{\rho}^{n+1} (e^{ik(j+1)\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x})$$

Wenn man nun  $\underline{\rho}^{n+1}$  in Termen von  $\underline{\rho}^n$  löst, erhält man

$$\underline{\rho}_i^{n+1} = \frac{1}{1 - \frac{iv\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)} \underline{\rho}^n$$

daher ergibt sich diesmal

$$G = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right)^2}}.$$

Dies ist für jede Wahl von  $v$  und  $\Delta x$  immer kleiner als 1 und damit stabil.

Übung: Teste die Stabilität für ein CTCS Differenzenschema. Dieses Verfahren wird auch “Staggered Leapfrog-Schema” genannt und ist in Raum und Zeit zur zweiten Ordnung genau.

### 3.7 Transporteigenschaften von Finite Differenzenmethoden

Außer der Genauigkeit und der Stabilität eines Verfahren sind noch andere wichtige Eigenschaften bei der Auswahl eines Finite Differenzenverfahren zu beachten. Ein solches Kriterium können die Transporteigenschaften sein, d.h. die Fähigkeit ein Signal in eine bestimmte Richtung zu transportieren.



Für die Dichtegleichung im FTCS Differenzenmodell ergibt sich unter der Annahme, daß  $v_i^n = v = \text{const.}$

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} = -v \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n}{2\Delta x}. \quad (47)$$

Wenn man jetzt zunächst annimmt die Dichte sei überall null und eine Störung wird an der Stelle  $x = x_i$  der Größe  $\rho_i = \epsilon$  angeschaltet, dann würde das FTCS-schema folgendes rechnen:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i+1}^{n+1} - 0}{\Delta t} &= -v \frac{0 - \epsilon}{2\Delta x} \\ \frac{\rho_i^{n+1} - \epsilon}{\Delta t} &= -v \frac{0 - 0}{2\Delta x} \\ \frac{\rho_{i-1}^{n+1} - 0}{\Delta t} &= -v \frac{\epsilon - 0}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (48)$$

d.h.

$$\begin{aligned} \rho_{i+1}^{n+1} &= \frac{v\epsilon\Delta t}{2\Delta x} \\ \rho_i^{n+1} &= \epsilon \\ \rho_{i-1}^{n+1} &= -\frac{v\epsilon\Delta t}{2\Delta x} \end{aligned}$$

Wenn man nun annimmt, daß  $v > 0$  ist, dann würde Glg. 48 bedeuten, daß die Störung sich stromaufwärts ausbreitet, was aber physikalisch falsch ist. Zusätzlich bedeutet Glg. 48, daß die Dichte bei  $i$  sich nicht ändert, selbst nachdem sich die Störung flußabwärts ausgebreitet hat (Glg. 48), was auch unphysikalisch ist. Man kann daraus schließen daß FTCS keine Transporteigenschaften beschreiben kann.

Glücklicherweise gibt es auch finite Differenzenmethoden die diese Eigenschaft erfüllen. Wir betrachten das folgende Finite Differenzenschema in dem die Dichtegleichung gegeben ist durch

$$\begin{aligned} \frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^{n+1}}{\Delta t} &= -\frac{\rho_i^n v_i^n - \rho_{i-1}^n v_{i-1}^n}{\Delta x} \text{ für } v_i^n > 0 \\ &-\frac{\rho_{i+1}^n v_{i+1}^n - \rho_i^n v_i^n}{\Delta x} \text{ für } v_i^n < 0 \end{aligned} \quad (49)$$

Wenn man wieder annimmt, daß  $v_i^n = v = \text{const} > 0$ , dann erhält man für den obigen Fall, wo die Dichte überall null ist und eine Störung der Art  $\rho_i^n \rightarrow \rho_i^n + \epsilon$ , dann erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\rho_i^{n+1} - \epsilon}{\Delta t} &= -\frac{v\epsilon - 0}{\Delta x} \\ \frac{\rho_{i+1}^{n+1} - 0}{\Delta t} &= -\frac{0 - v\epsilon}{\Delta x} \\ \frac{\rho_{i-1}^{n+1} - 0}{\Delta t} &= -\frac{0 - 0}{\Delta x} \end{aligned}$$

daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \rho_i^{n+1} &= \epsilon \left( 1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) \\ \rho_{i+1}^{n+1} &= \frac{v\epsilon\Delta t}{\Delta x} \\ \rho_{i-1}^{n+1} &= 0 \end{aligned}$$

In diesem Fall wndert die Störung nicht stromaufwärts, was ja physikalische Voraussetzung war. Die selbe Rechnung kann für  $v < 0$  ausgeführt werden, mit dem gleichen Ergebnis.

Das finite Differenzenschema gegeben durch Glg. 49 wird auch als “First upwind difference”-Schema gekannt und besitzt Transporteigenschaften, wie gerade gezeigt. Als nächstes soll gezeigt werden, daß dieses Schema auch konservativ ist unter der Voraussetzung, daß die Geschwindigkeit auf dem Gitter nicht umdreht. Danach werden wir ein “Upwind”-Scheme einführen, daß unabhängig von der Geschwindigkeitsrichtung auf dem Gitter konservativ ist.

Wie oben, betrachte man zunächst die zeitliche Ableitung der Gesamtmasse unter Verwendung des “First upwind difference”-Schema. Wenn man  $v_i < 0$  für  $0 \leq i \leq l$  und  $v_i > 0$  für  $l + 1 \leq i \leq N$  annimmt, dann

$$\begin{aligned}
\frac{dM}{dt} &= - \sum_{i=1}^l (\rho_{i+1}^n v_{i+1}^n - \rho_i^n v_i^n) - \sum_{i=l+1}^N (\rho_i^n v_i^n - \rho_{i-1}^n v_{i-1}^n) = \\
&- (\rho_1^n v_1^n - \rho_0^n v_0^n) - (\rho_2^n v_2^n - \rho_1^n v_1^n) - \dots \\
&- (\rho_l^n v_l^n - \rho_{l-1}^n v_{l-1}^n) - (\rho_{l+1}^n v_{l+1}^n - \rho_l^n v_l^n) \\
&- (\rho_{l+1}^n v_{l+1}^n - \rho_l^n v_l^n) - (\rho_{l+2}^n v_{l+2}^n - \rho_{l+1}^n v_{l+1}^n) \\
&- (\rho_{N-1}^n v_{N-1}^n - \rho_{N-2}^n v_{N-2}^n) - (\rho_N^n v_N^n - \rho_{N-1}^n v_{N-1}^n) \\
&= \rho_0^n v_0^n - \rho_{l+1}^n v_{l+1}^n + \rho_l^n v_l^n - \rho_N^n v_N^n \tag{50}
\end{aligned}$$

Der zweite und dritte Term erscheinen in Glg. 50, weil das System nicht allgemein konservativ ist. Diese beiden Terme agieren im Prinzip als Quelle und Senke für Massen auf dem Gitter. Die Massenänderung auf dem Gitter sollte nur durch den ersten und vierten Term gegeben sein, denn dies entspricht dem Fluß durch in und aus dem Gitter am Rand.

Ein “Upwind”- Schema, das konservative Eigenschaften hat ist das “Second upwind difference”-Schema oder “Donor Cell”-Schema:

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} = - \frac{\rho_R^n v_R^n - \rho_L^n v_L^n}{v} \Delta x \tag{51}$$

wobei

$$\begin{aligned}
v_R^n &= \frac{1}{2} (v_{i+1}^n + v_i^n) \\
v_L^n &= \frac{1}{2} (v_i^n + v_{i-1}^n) \tag{52}
\end{aligned}$$

und

$$\rho_R^n = \rho_i^n \text{ für } v_r^n > 0$$

$$\begin{aligned}
&= \rho_{i+1}^n \text{ für } v_r^n < 0 \\
\rho_L^n &= \rho_{i-1}^n \text{ für } v_r^n > 0 \\
&= \rho_i^n \text{ für } v_r^n < 0
\end{aligned} \tag{53}$$

Nun muß man nur noch  $dM/dt$  berechnen, um zu zeigen, daß das “Donor Cell”-Schema immer konservativ ist.

$$\begin{aligned}
\frac{dM}{dt} &= \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_i \Delta x \\
&= - \sum_{i=0}^N \left( \rho_{i+1/2}^n v_{i+1/2}^n - \rho_{i-1/2}^n v_{i-1/2}^n \right) \\
&= -\rho_{1/2}^n v_{1/2}^n + \rho_{-1/2}^n v_{-1/2}^n - \rho_{3/2}^n v_{3/2}^n + \rho_{1/2}^n v_{1/2}^n - \dots \\
&\quad -\rho_{N-1/2}^n v_{N-1/2}^n + \rho_{N-3/2}^n v_{N-3/2}^n - \rho_{N+1/2}^n v_{N+1/2}^n + \rho_{N-1/2}^n v_{N-1/2}^n \\
&= \rho_{-1/2}^n v_{-1/2}^n - \rho_{N+1/2}^n v_{N+1/2}^n
\end{aligned}$$

d.h. hier entspricht der Massefluß auf und von dem Gitter gerade dem Fluß am Rand.

Als nächstes soll die Stabilität des “Donor Cell”-Schemas untersucht werden. Wie zuvor nehmen wir der Einfachheit halber an, daß  $v_i^n = v = \text{constant} > 0$  ist, dann gilt

$$\frac{\rho_j^{n+1} - \rho_j^{n+1}}{\Delta t} = -v \frac{\rho_j^n - \rho_{j-1}^n}{\Delta x}$$

Für die Fouriermoden erhalten wir dann

$$\frac{e^{ik(j\Delta x)} (\underline{\rho}^{n+1}(k) - \underline{\rho}^n(k))}{\Delta t} = -\frac{v \underline{\rho}^n}{\Delta x} (e^{ikj\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x})$$

Auflösen nach Termen von  $\underline{\rho}^n(k)$  ergibt

$$\underline{\rho}^{n+1}(k) = \underline{\rho}^n(k) \left( 1 - \cos(k\Delta x) \right) - i \frac{v\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x) \underline{\rho}^n(k). \tag{54}$$

Die Größe  $\underline{\rho}^{n+1}(k)/\underline{\rho}^n(k)$  muß kleiner oder gleich 1 sein, damit das “Donor Cell”-Schema stabil ist, d.h.

$$\sqrt{1 - \frac{2v\Delta t}{\Delta x} \left(1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x}\right) (1 - \cos(k\Delta x))} \leq 1 \quad (55)$$

oder

$$\frac{2v\Delta t}{\Delta x} \left(1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x}\right) (1 - \cos(k\Delta x)) \geq 0. \quad (56)$$

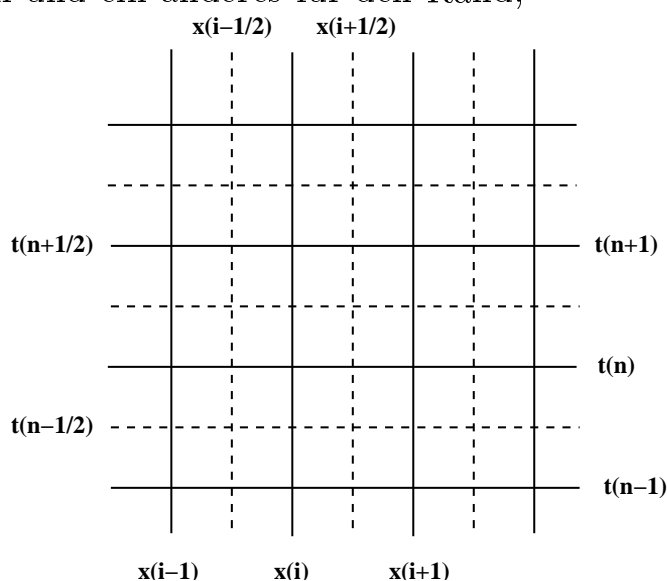
Da jedoch  $1 - \cos(k\Delta x) > 0$ , muß zur Stabilität die Bedingung

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{v} \quad (57)$$

erfüllt sein. Diese Bedingung wird **Courant-Friedrichs-Lewy-Stabilitätsbedingung** genannt. Sie beschreibt, daß bei entsprechender Zeitschrittwahl, das “Donor Cell”-Schema stabil ist.

### 3.8 Monotonität

Wenn man ein abgestuftes Gitter einführt, d.h. ein Gitter für des Zentrum und ein anderes für den Rand,



dann erhalten wir für “Second upwind difference”-Schema aus Glg. 51:

$$\frac{\rho_{i+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2}^n}{\Delta t} = -\frac{(\rho v)_{i+1} - \rho v)_i}{\Delta x}, \quad (58)$$

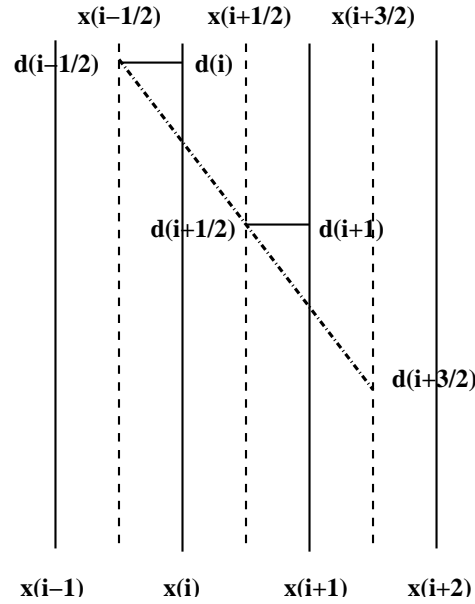
wobei halbzahlige Indizes sich auf Zentralzonen und ganzzahlige Indizes sich auf Randzonen beziehen. Glg. 58 ist eine räumlich zentrierte Differenzgleichung und hat demzufolge einen Abschneidefehler der Ordnung  $O((\Delta x)^2)$ . Allerdings gilt nun, daß  $\Delta x = x_{i+1} - x_i$  statt zuvor  $\Delta x = x_{i+1} - x_{i-1}$ .

Glg. 58 kann man folgermaßen interpretieren: Die Dichte in den Zentralzonen ändert sich als Folge des Massenflusses an den Zonengrenzen. Da aber der Massenfluß auch die Geschwindigkeiten beinhaltet, sollte auch das Geschwindigkeitsprofil in  $x$  an den Zonenrändern diskretisiert werden. Ebenso gilt dies für das Dichteprofil in  $x$  im Zonenzentrum, d.h.  $v = v_i : i = 1, \dots, N$  und  $\rho = \rho_{i+1/2} : i = 1, \dots, N$ . Wenn man nun in Glg.58 die lineare Interpolation zweiter Ordnung von  $\rho_{i+1/2}$  einführt, um  $\rho_i$  und  $\rho_{i+1}$  zu definieren, würden man wiederum einen Abschneidefehler zweiter Ordnung erhalten.

Wenn die Dichte in der Zone  $[x_i, x_{i+1}]$  als linear angenommen wird oder genauer *stückweise linear* über das Gitter, dann ist die Dichte im Zonenzentrum gleich dem Mittelwert der Dichte in der Zone. Obige finite Differenzierung und Interpretation wird auch Kontrolldifferenzierung genannt.

Es existieren eine Reihe unterschiedlicher Methoden um die Dichte von den Zonenzentren zu den Zonenrändern zu interpolieren. Hier werden wir nur solche Methoden untersuchen die Monotonität der Kontinuumsverteilung erhalten.

Zum Beispiel kann man die Kontinuumsdichteverteilung mit der “Donor-Cell”-Methode interpolieren (schräge Linie in Abbildung).



Wenn man  $\rho_{i+1} = \rho_{i+1/2}$  setzt, würde die diskrete Verteilung weit über die Kontinuumsverteilung an den Rändern hinauschießen. Folglich wäre der Massenfluß an den Zonenrändern bei weitem zu groß und die Dichteverteilung würde sich künstlich ausdehnen. Daher ist das “Donor-Cell”-Verfahren für die Beschreibung der Zonenranddichte *numerisch diffusiv*.

Als nächstes soll die Barton-Methode untersucht werden. Zunächst nehme man an, daß  $v > 0$ . Man kann dann drei Zonengrenzsdichten bei  $i + 1$  konstruieren

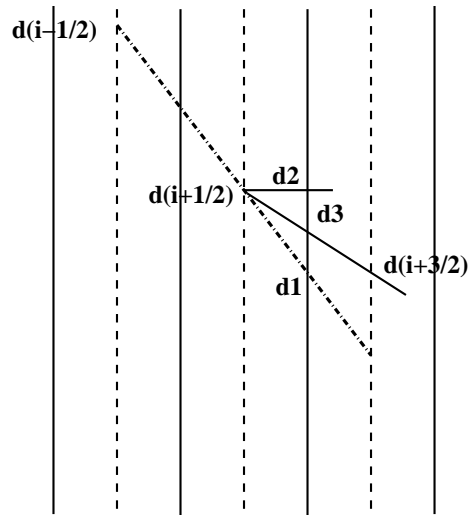
$$\begin{aligned}
 \rho_1 &= \rho_{i+1/2} + \frac{\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} (x_{i+1} - x_{i+1/2}) \\
 \rho_2 &= \rho_{i+1/2} + \frac{\rho_{i+3/2} - \rho_{i+1/2}}{x_{i+3/2} - x_{i+1/2}} (x_{i+1} - x_{i+1/2}) \\
 \rho_3 &= \rho_{i+1/2}.
 \end{aligned} \tag{59}$$

Nach der Barton-Methode wird dann die Dichte bei  $i + 1$

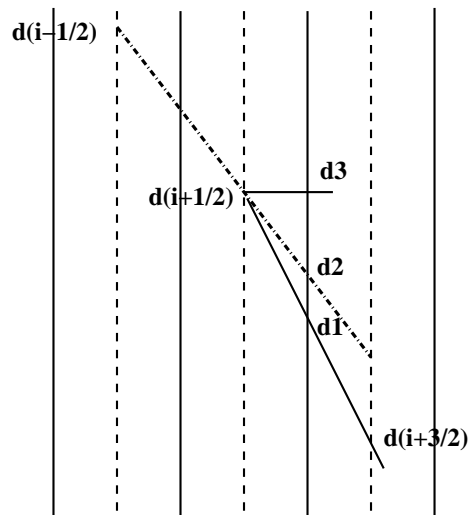
$$\begin{aligned}
 \rho_{i+3/2} < \rho_{i+1/2} &\longrightarrow \rho_{i+1}^* = \max(\rho_1, \rho_2) \\
 \rho_{i+1/2}^* < \rho_3 &\longrightarrow \rho_{i+1} = \rho_{i+1}^* \\
 \rho_{i+1/2}^* > \rho_3 &\longrightarrow \rho_{i+1} = \rho_3 \\
 \rho_{i+3/2} > \rho_{i+1/2} &\longrightarrow \rho_{i+1}^* = \min(\rho_1, \rho_2)
 \end{aligned} \tag{60}$$

$$\begin{aligned} \rho_{i+1}^* < \rho_3 &\longrightarrow \rho_{i+1} = \rho_3 \\ \rho_{i+1}^* > \rho_3 &\longrightarrow \rho_{i+1} = \rho_{i+1}^* \end{aligned}$$

Zwei Beispiele werden hier gezeigt.



Hier ist  $\rho_{i+1} = \rho_1$ .



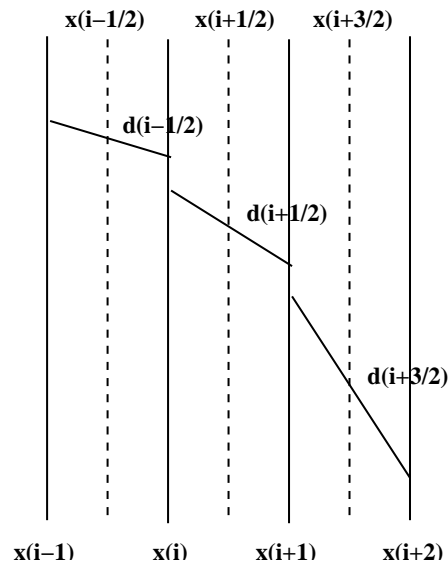
und  $\rho_{i+1} = \rho_2$ . Zusammengefaßt kann man sagen, daß für eine monoton fallende lokale Sequenz  $\rho_{i-1/2}, \rho_{i+1/2}, \rho_{i+3/2}$  der minimale Abfall

$$\begin{aligned} SLOPE_{min} = \min & \left( \text{abs}[(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2})(x_{i+1/2} - x_{i-1/2})], \right. \\ & \left. \text{abs}[(\rho_{i+3/2} - \rho_{i+1/2})(x_{i+3/2} - x_{i+1/2})] \right) \end{aligned}$$



verwendet wird, um die Dichte zu interpolieren, um  $\rho_{i+1}$  zu erhalten. Falls die lokale Sequenz nicht monoton fallend ist, (z.B. wenn  $\rho_{i+1/2}$  lokales Minimum) dann folgt  $\rho_{i+1} = \rho_3$ .

Wenn die Zonenranddichten auf diese Weise gewählt werden, dann erhält die stückweise diskrete Darstellung der Dichte die Monotonität der Kontinuumsdichteverteilung.



Mit anderen Worten, die stückweise diskrete Darstellung der Dichte wird monoton fallen bzw. wachsen, wenn die Kontinuumsdichteverteilung monoton wächst oder fällt.

Eine andere Methode, die die diskrete Monotonität sicherstellt, ist das Van Leer-Schema:

$$\begin{aligned} \rho_i &= \rho_{i-1/2} + (1/2)d\rho_{i-1/2} \text{ für } v > 0 \\ &= \rho_{i+1/2} - (1/2)d\rho_{i+1/2} \text{ für } v < 0 \end{aligned} \quad (61)$$

wobei

$$\begin{aligned} d\rho_{i+1/2} &= \Delta\rho_i \Delta\rho_{i+1} / \left( \frac{\Delta\rho_i + \Delta\rho_{i+1}}{2} \right) \text{ für } \Delta\rho_i \Delta\rho_{i+1} > 0 \\ &= 0 \text{ sonst} \end{aligned} \quad (62)$$

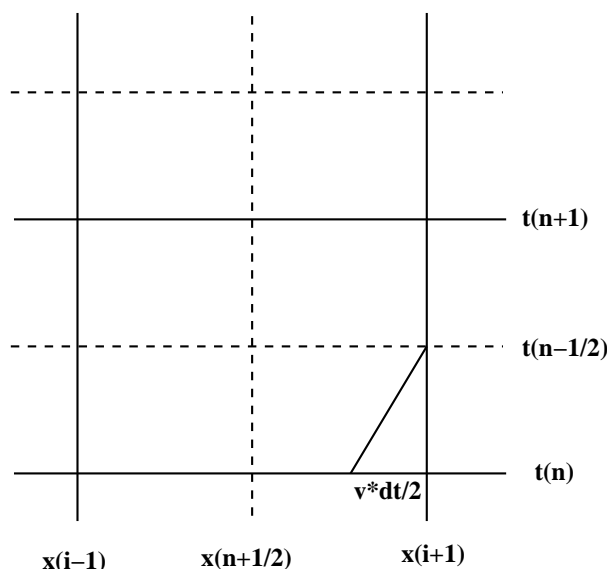
und

$$\Delta\rho_i = (\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}) / (x_{i+1/2} - x_{i-1/2}). \quad (63)$$

Obig behandelte Methoden haben einen räumlichen Abschneidefehler zweiter Ordnung, sind monoton und reduzieren damit numerische Diffusion. Wir wenden uns nun dem zeitlichen Abschneidefehler zweiter Ordnung zu. Eine Darstellung der Dichtegleichung, die in zweiter Ordnung genau in  $\Delta x$  und  $\Delta t$  ist, ist

$$\frac{\rho_{i+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2}^n}{\Delta t} = - \frac{(\rho v)_{i+1}^{n+1/2} - (\rho v)_i^{n+1/2}}{\Delta x} \quad (64)$$

Da wir schon eine monotone Methode zweiter Ordnung für  $(\rho v)_i$  haben, müssen wir noch eine zeitlich zur zweiten Ordnung genau Methode finden. D.h. man muß ein Verfahren finden bei dem der Massenfluß an den Zonengrenzflächen beim halbzahligen Zeitschritt  $t^{n+1/2} : n = 0, 1, \dots$  stimmt. Das Flüssigkeitselement bei  $x_i$  und  $t_{n+1/2}$  ist hervorgegangen aus  $x = x_i - v\Delta t/2$  bei  $t^n$ .



Es wird angenommen, daß der Zeitschritt  $\Delta t$  klein genug ist, daß die Fluidcharakteristiken als gerade Linien angenommen werden können. Daher ist der Massefluß bei  $x_i$  und  $t_{i+1/2}$  definiert durch die Dichte bei  $x_i - v\Delta t/2$  und  $t^n$ . Die Dichte kann man unter Verwendung eines der zuvor erwähnten Interpolationsverfahren gewinnen. Für das Barton-

Verfahren ergibt sich

$$\rho_{i+1}^{n+1/2} = \rho_{i+1/2}^n + \min \left( \text{abs} \left[ \left( \frac{\rho_{i+3/2} - \rho_{i+1/2}}{x_{i+3/2} - x_{i+1/2}} \right) \right], \text{abs} \left[ \left( \frac{\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \right) \right] \right) \times (\Delta x - v\Delta t) / 2$$

Den Massenfluß bei  $x_i$  und  $t^{n+1/2}$  kann man bestimmen, wenn die Dichte und Geschwindigkeit bei  $x_i$  und  $t^{n+1/2}$  bekannt sind. Die Geschwindigkeit ist bei  $x_i$  zentriert, außerdem ist sie zeitlich zentriert für  $t^{n+1/2}$ . Daher ist keine räumliche oder zeitliche Interpolation zur Bestimmung der Geschwindigkeit notwendig, um den Massenfluß zur zweiten Ordnung zu bestimmen.

**Lax-Wendroff:** (Beispiel Advektionsgleichung):

Differenzenschema 2. Ordnung

Taylor-Entwicklung

$$a(x, t + \tau) = a(x, t) + \tau \left( \frac{\partial a}{\partial t} \right) + \frac{\tau^2}{2} \left( \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} \right) + \dots$$

Advektionsgleichung:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} F(a)$$

mit  $F(a) = ca$ . Differenzieren ergibt:

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t^2} = -\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} F(a) = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial F}{\partial t}$$

wobei  $F'(a) = c$  für die Advektionsgleichung. Einsetzen ergibt:

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} F'(a) \frac{\partial F}{\partial x}$$

Anwendung der Taylor-Entwicklung ergibt:

$$a(x, t + \tau) \sim a(x, t) - \tau \left( \frac{\partial}{\partial x} F(a) \right) + \tau^2 \left( \frac{\partial}{\partial x} F'(a) \frac{\partial F}{\partial x} \right)$$

Diskretisieren ergibt das Lax-Wendroff-Schema:

$$\begin{aligned} a_i^{n+1} &= a_i^n - \tau \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2h} + \frac{\tau^2 [F'(\partial F/\partial x)]_{i+1/2} - [F'(\partial F/\partial x)]_{i-1/2}}{h} \\ &= a_i^n - \tau \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2h} + \frac{\tau^2}{2h} \left[ F'_{i+1/2} \frac{F_{i+1} - F_i}{h} - F'_{i-1/2} \frac{F_i - F_{i-1}}{h} \right] \end{aligned}$$

wobei  $F_i = F(a_i^n)$  und  $F'_{i+/-1/2} = F'[(ai + / - 1 + a_i^n)/2]$ . Für die Advektion gilt:  $F_i = ca_i^n$  und  $F_{i+/-1/2} = c$ .

$$\longrightarrow a_i^{n+1} = a_i^n - \frac{c\tau}{2h}(a_{i+1}^n - a_{i-1}^n) + \frac{c^2\tau^2}{2h^2}(a_{i+1}^n - a_{i-1}^n - 2a_i^n)$$

Beachte: Letzter Term diskretisiert 2. Ableitung. Künstliche Viskosität, die die numerische Lösung stabilisiert. Für Lax-Wendroff gilt auch CFL-Bedingung für Stabilität.

### 3.9 Operator Splitting

Bisher haben wir nur das finite Differenzenschema für die Dichtegleichung mit den Transporteigenschaften behandelt. Aber die Transportterme in der Geschwindigkeitsgleichung und der Gleichung für die innere Energie werden in ähnlicher Weise behandelt. Unter der Berücksichtigung des “staggered gridding” des vorherigen Kapitels, kann man die finite Differenzendarstellung für alle Transportterme wie folgt schreiben:

$$\frac{\rho_{i+1/2}^{n+1} - \rho_{i+1/2}^n}{t^{n+1} - t^n} = - \frac{(\rho v)_{i+1}^{n+1/2} - (\rho v)_i^{n+1/2}}{x_{i+1} - x_i} \quad (65)$$

$$\frac{\epsilon_{i+1/2}^{n+1} - \epsilon_i^n}{t^{n+1} - t^n} = - \frac{(\epsilon v)_{i+1}^{n+1/2} - (\epsilon v)_i^{n+1/2}}{x_{i+1} - x_i} \quad (66)$$

$$\frac{(\rho v)_i^{n+1/2} - (\rho v)_i^{n-1/2}}{t^{n+1/2} - t^{n-1/2}} = - \frac{(\rho v^2)_{i+1/2}^n - (\rho v^2)_{i-1/2}^n}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \quad (67)$$

Für die Dichtegleichung ist das finite Differenzenschema komplett, aber für die innere Energie und die Geschwindigkeitsgleichung müssen noch Terme untersucht werden.

Hierzu kann man eine weitgebräuchliche Notation einführen; das sogenannte Operator Splitting. Die Hydrodynamischen Gleichungen können in Operatorenschreibweise folgendermaßen dargestellt werden:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = L(Y) \quad (68)$$

wobei  $Y = \rho, \epsilon, v$  ist und allgemein

$$L(Y) = L_1(Y) + L_2(Y) + \dots \quad (69)$$

Wenn man Operator Splitting verwendet reduziert sich das Problem der Lösung des hydrodynamischen Gleichungen auf das Lösen einer Sequenz einfacher finiter Differenzgleichungen:

$$\frac{Y^1 - Y^n}{\Delta t} = [L_1(Y)]_{FD} \quad (70)$$

$$\frac{Y^2 - Y^1}{\Delta t} = [L_2(Y)]_{FD} \quad (71)$$

wobei der Index "FD" eine finite Differenzendarstellung der Operatoren  $L_1, L_2, \dots$  darstellt.

Nach dem Transportschritt sollte nun auch noch der Quellschritt in der Operatorenschreibweise dargestellt werden

$$\frac{\epsilon}{t_{src}} = - \left( \frac{P}{\rho} - \epsilon \right) \frac{\partial v}{\partial x} \quad (72)$$

$$\frac{(\rho v)_i^{n+1/2} - (\rho v)_i^{n-1/2}}{t^{n+1/2} - t^{n-1/2}} \left( \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} \right)_{src} = - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (73)$$

Zur zweiten Ordnung

$$\frac{\epsilon_{i+1/2}^* - \epsilon_{i+1/2}^n}{t^{n+1} - t^n} = -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\rho_{i+1/2}^{n+1/2}} (P_{i+1/2}^* - P_{i+1/2}^n) - (\epsilon_{i+1/2}^* - \epsilon_{i+1/2}^n) \right] \times \frac{v_{i+1}^{n+1/2} - v_i^{n+1/2}}{x_{i+1} - x_i} \quad (74)$$

$$\frac{(\rho v)_i^{n+1/2} - (\rho v)_i^{n-1/2}}{t^{n+1/2} - t^{n-1/2}} = -\frac{P_{i+1/2}^n - P_{i-1/2}^n}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \quad (75)$$

wobei  $\rho_{i+1/2}^{n+1/2} = (\rho_{i+1/2}^n + \rho_{i+1/2}^{n+1})/2$ . Bei dem Quellschritt der inneren Energie wird ein iterativer Prozeß benötigt.  $\epsilon_{i+1/2}^*$  ist ein teilwieser Update der inneren Energie unter Voraussetzung eines partiellen Updates des Druckes  $P_{i+1/2}^*$ . Den Druck erhält man aus einer Hilfsbeziehung oder Zustandsgleichung :  $P = P(\rho, \epsilon)$ . Wenn man Glg. ?? zuerst löst ist  $P_{i+1/2}^* = P_{i+1/2}^n$ . Die neue innere Energie  $\epsilon_{i+1/2}^*$  wird dann benutzt um den neuen Druck zu erhalten:  $P_{i+1/2}^* = P(\rho_{i+1/2}^{n+1/2}, \epsilon_{i+1/2}^*)$  und der Prozeß wird iteriert bis  $\epsilon_{i+1/2}^*, P_{i+1/2}^* \longrightarrow \epsilon_{i+1/2}^{n+1/2}, P_{i+1/2}^{n+1/2}$ . Dies wird erreicht, wenn die relative Differenz zweier sukzessiven Updates der inneren Energie einen vorgegebene Toleranzwert unterschreiten.

### 3.10 Zustandsgleichung und Viskosität

Eulersche Form der hydrodynamischen Gleichungen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \underline{v} = 0 \quad (76)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + -\nabla \rho \underline{v} \underline{v} = -\nabla P \quad (77)$$

$$\frac{\partial(\epsilon)}{\partial t} + -\nabla(\rho \epsilon \underline{v}) + P \nabla \underline{v} = 0 \quad (78)$$

Gleichungen werden durch Zustandsgleichung des Systems ergänzt.

→ Thermodynamische Eigenschaften des Systems.

Zustandsgleichung: Beziehung zwischen innerer Energie und Dichte und Druck.

$$\epsilon = \epsilon(P, \rho) \quad (79)$$

Ideales Gas:

$$\epsilon = \frac{kT}{m(\gamma - 1)} = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)}$$

wobei  $\gamma$  das Verhältnis der spez. Wärme ( $\gamma = 5/3$  für monoatomares Gas),  $m$  = molekulare Masse,  $k$  = Boltzmann Konstante und  $T$  = Temperatur.

Advektion: Größen der Flüssigkeit werden durch Flüssigkeitsbewegung transportiert. Formulierung der hydrodynamischen Glg. in Termen der zeitlichen Ableitung relativ zur bewegten Flüssigkeit

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \underline{v} \nabla$$

Differenzieren der Divergenz in hydrodynamischen Gleichungen ergibt die Lagrange Formulierung der hydrodynamischen Gleichungen

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \underline{v} = 0 \quad (80)$$

$$\rho \frac{d\underline{v}}{dt} = -\nabla P \quad (81)$$

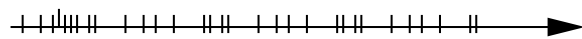
$$\rho \frac{d\epsilon}{dt} = -P \nabla \underline{v} = 0 \quad (82)$$

Beim idealen Gas reduziert sich die Energiegleichung auf das Adiabaten-gesetz.

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^\gamma} \right) = 0$$

### Vergleich: Lagrange und Eulersche Formulierung:

Das sich mitbewegende **Lagrange**-Gitter eignet sich besonders um hydrodynamische Phänomene wo z.B. Schallwellen durch sukzessives Bunchen und Öffnen auf dem Gitter entstehen.



Außerdem hat das mitbewegte Gitter den Vorteil die Punkte in interessanten Bereichen zu konzentrieren (z.B. bei Stoßwellen). Damit verbessert sich automatisch die Genauigkeit in solchen Bereichen.

Bei mehrdimensionalen Problemen und kompressiblen Flüssigkeiten wird meist die Eulersche Formulierung verwendet.

Wenn die mittlere freie Weglänge nicht mehr als klein betrachtet werden kann, muß man den Transport von Impuls und Energie einbeziehen. Man bezeichnet die Flüssigkeit dann als viskos. In den hydrodynamischen Gleichungen macht sich dies durch einen Viskositätstensor  $\underline{V}$  bemerkbar.

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = -\nabla(\rho \underline{v} v + p \underline{I} + \underline{V})$$

Dieser Drucktensor muß natürlich auch in der Energiegleichung berücksichtigt werden. Wenn man noch den Wärmefluß mit einbezieht, ergibt sich für die Gleichung der inneren Energie

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + (p \underline{I} + \underline{V}) : \nabla \underline{v} + \nabla(\rho \epsilon \underline{v}) + \underline{q} = 0$$

Die Diffusionsprozesse, ob durch Wärmeleitung oder Viskosität, sind mit den Temperatur oder Geschwindigkeitsgradienten der Flüssigkeit verbunden. Für die Wärmeleitung erhält man dann:

$$\underline{q} = -\kappa \nabla T$$



wobei  $\kappa$  der Wärmeleitkoeffizient ist. Ähnlich gilt für den Viskositätstensor die Beziehung zum Navier-Stokes-Tensor  $\underline{U}$

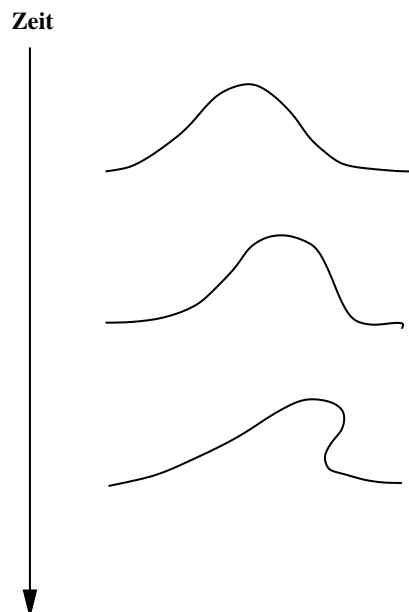
$$\underline{V} = \mu \underline{U}$$

wobei  $\mu$  die Viskosität der Flüssigkeit ist.

Sowohl  $\mu$  als auch  $\kappa$  hängen von der Stoßrate ab, die die Teilchen im System erfahren, d.h. sie hängen von der lokalen Temperatur und Dichte ab. Dadurch können die Transportterme nichtlinear werden.

### 3.11 Stoßwellen

Störungen in Flüssigkeiten breiten sich mit der lokalen Schallgeschwindigkeit aus. Wenn die Schallgeschwindigkeit sich mit der Position ändert, kann es dazu kommen, daß sich Schallwellen aufteilen. Dies kann z.B. in kompressiblen Flüssigkeiten geschehen. Dazu kann es kommen, wenn das "Ende" der Welle sich schneller bewegt als der "Anfang". Wenn sich dieses Aufteilen der Welle fortsetzt, wird die Welle schließlich brechen. Das Problem besteht darin, daß an diesem Punkt dann die Dichte und alle anderen Eigenschaften, die die Flüssigkeit beschreiben Mehrfachwerte bekommen.



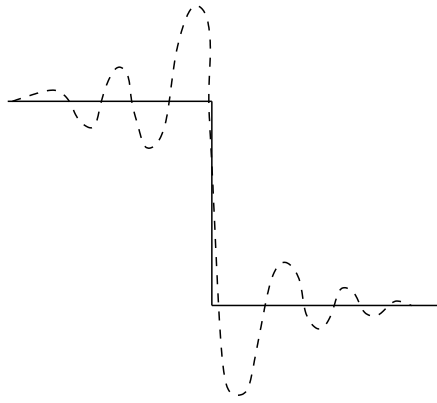
An der Bruchstelle breitet sich eine Stoßwelle aus, die eine Diskontinuität in der Dichte, inneren Energie und Geschwindigkeit darstellt. Die Bewegung der Stoßwelle wird bestimmt durch die Stoßsprungbedingungen, die sich aus den hydrodynamischen Gleichungen herleiten und die Erhaltungssätze von Masse, Energie und Impuls widerspiegeln.

Das Entstehen von Stoßwellen kann man aber auch in anderer Weise verstehen. Die hydrodynamischen Gleichungen sind nichtlinear. Daher sind unterschiedliche Fouriermoden gekoppelt und Energie kann von langwelligen zu kurzwelligen Moden kaskadieren. Diesen Effekt sieht man nicht für lineare Gleichungen oder für nichtlineare Gleichungen in einer linearen Region, denn im linearen Fall sind die Fouriermoden entkoppelt.

In Wirklichkeit wird auf der mikroskopischen Skala Energie in kürzere Wellenlängen durch viskose Mechanismen dissipiert. Dadurch wird verhindert, daß Werte vielfach belegt werden. Auf dem Gitter stellen Stoßwellen ein Problem dar, denn

- wir behandeln nicht-viskose Flüssigkeitgleichungen  
→ keine viskose Dissipation bei kurzwelligen Energien
- keine Struktur im Fluß deren Wellenlänge kleiner als  $2\Delta x$  kann aufgelöst werden

Bei einer Differenzendarstellung kaskadiert die Energie in die kürzeste Wellenlänge auf dem Gitter, d.h. die Zellgröße. Daher werden große Schwingungen in die angrenzenden Zellen induziert. Diese Effekte sind nicht physikalischer sondern rein numerischer Natur und können auch die numerische Lösung im langwelligen Bereich extrem stören.



Allerdings gibt es dennoch Möglichkeiten Stoßwellen zu behandeln. Hier wollen wir die Richtmyer-von Neumann-Methode zeigen. Sie fügen den hydrodynamischen Gleichungen eine künstliche Viskosität zu. Diese künstliche Viskosität soll den natürlichen phänomenologischen Dissipationsmechanismus nachahmen, der in wirklichen Flüssigkeiten vorhanden ist.

**künstliche Viskosität** : Energie der Gitterfluktuationen  $\longrightarrow$  thermische Energie

Bei der Richtmyer-von Neumann-Methode wird die künstliche Dissipation durch die Substitution

$$P \longrightarrow P + Q \quad (83)$$

den hydrodynamischen Gleichungen zugefügt. Wenn das System selbst eine hohe natürliche Viskosität hat, ist dies nicht nötig.

Die künstlich Viskosität soll durch Diffusion alle Diskontinuitäten so aufweiten, daß sie über mehr als eine Zellgröße ausbreiten ohne die eigentliche Lösung über große Wellenlängen zu beeinflussen. D.h. die künstliche Viskosität muss Wellenlängen abhängig sein.  $Q$  ist ein künstlicher viskoser Druck, der folgendermaßen definiert ist:

$$Q = l^2 (\Delta x)^2 \rho \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad \text{für } \frac{\partial v}{\partial x} < 0$$

$$= 0 \quad \text{sonst} \quad (84)$$

In Glg. 84 ist  $l$  eine dimensionslose Konstante, die zumindest teilweise die Stärke der künstlichen Viskosität bestimmt. Im wesentlichen stellt es die Anzahl der Zonen dar, über die die künstliche Viskosität die Stoßwelle ausschmiert und wird typischerweise als  $l = 2 - 3$  gewählt.

Der Diffusionskoeffizient ist nur groß in Bereichen schnell variierender Geschwindigkeiten.

#### **Weiterführende Probleme:**

- Grenzwertprobleme
- Gekrümmte Koordinaten
- Mehrdimensionale Codes

## 4 SPH - Smoothed Particle Hydrodynamics

Smoothed particle hydrodynamics: hydrodynamische Beschreibung mit Vielteilchenmethoden (Monaghan: ARAA 30 (1992), S.392).

Im Gegensatz zu “normalen” Vielteilchencodes haben die Teilchen dabei **intrinsische Eigenschaften** wie Dichte, Druck, etc. Diese Eigenschaften werden durch **Summation über die nächsten Nachbarn** der einzelnen Teilchen bestimmt.

SPH-Codes sind numerisch ähnlich zu Vielteilchencodes für Systeme mit kurzreichweitigen Kräften.

**Hauptanwendungsgebiet:** Dynamik von Galaxien und Akkretions-scheiben Kosmologie

Aber auch Kometeneinschlagsrechnungen, (Geschosse), Einspritzung in Motoren

Aber mathematischer Beweis der Korrektheit dieser Methode fehlt immer noch!

Hydrodynamische Beschreibung des physikalischen Systems durch eine kompressible Flüssigkeit. Die Bewegungsgleichungen sind in Lagrange-Formulierung

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \mathbf{v} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} &= \frac{1}{\rho} (-\nabla P + \nabla \mathbf{V} + \rho \mathbf{f}) \\ \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) u &= -P \nabla \mathbf{v} + V_{\alpha\beta} \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \mathcal{L}\end{aligned}\quad (85)$$

wobei  $V$  (oder in Komponentendarstellung  $V_{\alpha\beta}$ ) der Viskositätstensor,  $u$  die thermische Energie pro Masseneinheit,  $P$  der Druck und  $\mathcal{L}$  die Quellen und Senken der Energie, wie z.B. Strahlung. Wie zuvor werden diese Gleichungen ergänzt durch die Zustandsgleichung des Systems und im allgemeinsten Fall noch die Strahlungstransportgleichung. Wenn man das System als isotherm annimmt, dann gilt  $\mathcal{L} = 0$ .

### **Warum Vielteilchenmethode zur Beschreibung der Hydrodynamik?**

Gitterbasierte Finite Differenzen Methoden können Probleme haben mit komplexen Geometrien (z.B. Stoß zweier Galaxien) speziell mit offenen Rändern. Speziell kann es bei astrophysikalischen Anwendungen auch Probleme geben gleichzeitig Gravitationskräfte explizit einzubeziehen, wenn diese stark lokal variieren (Stichwort: Eigengravitation).

Erste SPH-Codes: Lucy (1977) und Gingold und Monaghan 1983)

Grundlegende Idee:

- Gas wird in Flüssigkeitselemente unterteilt.
- System von Lagrange-Gleichungen wird gelöst
- Unterbereich der Fluidelemente wird durch Teilchen repräsentiert
- Teilchen werden wie in Vielteilchencode behandelt
- Teilchenmassendichte ist proportional zu Fluidichte  $\rho$ .

Da die Zahl der Simulationsteilchen endlich ist, muß Glättung (“smoothing”) der Teilchen über einen Bereich  $V$  eingeführt werden, um die

Feldgrößen als kontinuierliche Größen darzustellen. Eine geglättete Größe ist gegeben durch

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int_V W(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; h) f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (86)$$

Unter Verwendung der Beziehung  $\langle A(r)/B(r) \rangle = \langle A(r) \rangle / \langle B(r) \rangle$  kann man zeigen, daß

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{f(\mathbf{r}_i)}{\langle n(\mathbf{r}_i) \rangle} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i; h). \quad (87)$$

wobei  $n_i = \rho_i/m_i$ . Die geglättete Dichte ist dann gegeben durch

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N m_j W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h), \quad (88)$$

wobei  $m_j$  die Masse jedes Teilchens ist. Die Größe  $h$  ist dann die Glättungslänge und  $W(\mathbf{r}, h)$  die Glättungsfunktion.

Die Glättungsfunktion muß folgende Eigenschaften haben:

- Normalisierung:  $\int_V W(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$
- Für  $r \rightarrow 0$  muß  $W(\mathbf{r}) \rightarrow \delta(\mathbf{r})$

Zur richtigen Repräsentation im Kontinuumslimit.

Meist verwendete Glättungsfunktion: Sphärisch symmetrische Splinefunktion

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi h^3} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} \left(\frac{r}{h}\right) & \text{for } 0 \leq \frac{r}{h} \leq 1 \\ \frac{1}{4} - \left(2 - \left(\frac{r}{h}\right)\right)^3 & \text{for } 1 \leq \frac{r}{h} \leq 2 \\ 0 & \text{for } \frac{r}{h} \geq 2. \end{cases}$$

Bei dieser Glättungsfunktion gilt  $W(r, h) = 0$  für  $r/h \geq 2$  und nur Teilchen innerhalb eines Radius von 2 Glättungslängen tragen zu der Summe in Glg.(88) bei. Die ersten und zweiten Ableitungen sind kontinuierlich und zur zweiten Ordnung im Sinne  $\langle f(\mathbf{r}) \rangle = f(\mathbf{r}) + O(h^2)$ .

Die Interpolationsvorschrift der Dichte (Glg. 88) kann verallgemeinert werden für jedes Feld  $A(\mathbf{r})$

$$\langle A(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{i=1}^N m_j \frac{A(\mathbf{r}_j)}{\rho_j} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h). \quad (89)$$

Die Gradienten der lokalen Fluideigenschaften kann man ähnlich durch Ersetzen der physikalischen Variablen durch die Ableitung der Glättungsfunktionen erhalten

$$\langle \nabla f(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{f(\mathbf{r})}{\langle n(\mathbf{r}_i) \rangle} \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i; h). \quad (90)$$

Wenn es sich nicht um ein druckfreies System handelt, müssen die Ableitungen der Glättungsfunktion  $\nabla W$  existieren. Die zweite Ableitung  $\nabla^2 W$  existiert nur in diffusiven Systemen.

Jedes Teilchen bewegt sich gemäß der Lagrange Form von Eqs.(85),

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \nabla P_i + \mathbf{a}_i^{visc} - \nabla \Phi(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (91)$$

wobei  $P_i$  der Druck ist und  $\mathbf{a}_i^{visc}$  den Effekt der viskosen Kräfte beschreibt und  $\Phi_i$  das Gravitationspotential darstellt.

Zusätzlich zu den Bewegungsgleichungen benötigt man noch die Zustandsgleichung.

**Berechnung der nächsten Nachbarn** innerhalb 2mal Glättungsradius:

- Gitterbasierte Methoden (siehe kurzreichweitige Kräfte)
- Hierarchische Treecodes



Hierarchical Treemethoden sind 2–3 mal langsamer als gitterbasierte Methoden, aber effektiver bei inhomogenen Verteilungen und oft sinnvoll da gleiche Struktur verwendet werden kann, um Gravitationskräfte im System zu berechnen.

**Viskosität:** systemimmanente und/oder künstliche

Meist verwendete Viskositätsbeschreibung für SPH (Monaghan)

$$\mathbf{a}_i^{visc} = \sum_j m_j \Pi_{ij} (\nabla_i W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h_j)), \quad (92)$$

$$\text{wobei} \quad \Pi_{ij} = \frac{-\alpha \mu_{ij} c_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\rho_{ij}} \quad (93)$$

mit

$$\begin{cases} \mu_{ij} = \frac{\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{h_{ij}(r_{ij}^2/h_{ij}^2) + \nu^2} & \text{for } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} < 0 \\ = 0 & \text{for } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} > 0, \end{cases}$$

wobei  $ij$  meint  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ,  $c$  die mittlere Schallgeschwindigkeit ist und  $\nu$  numerische Divergenz verhindert. Der zweite Term entspricht der Von Neumann-Richtmyer künstlichen Viskosität (verhindert Teilchendurchdringung bei hohen Machzahlen, Stoßwellen können sich bilden und Oszillationen nach Stoßwellen werden gedämpft).

### Glättungslänge

Zwei Methoden: feste oder adaptive Glättungslänge

**Feste Glättungslänge:** alle Teilchen haben die gleiche Glättungslänge und sie bleibt auch konstant während des zeitlichen Verlaufs der Simulation.

Vorteil: die räumliche Auflösung ist konstant im gesamten Simulationsbereich

Nachteil: in Bereichen niedriger Dichte könnten zu wenige Teilchen zu der Glättungsprozedur beitragen.

**Adaptive Glättungslänge:** Jedes Teilchen hat seine eigene zeitlich variable Glättungslänge

Glättungslänge paßt sich lokaler Dichte an (konstante Zahl von Nachbarn)

Vorteil: auch Bereiche niedriger Dichte werden gut aufgelöst

Nachteil: Symmetrie in der Dichtebehandlung muß gewährleistet werden.

Eine Methode:  $(h_i + h_j)/2$  für  $h_i$  und  $h_j$ .

## 5 Magnetohydrodynamik - MHD

Klassische Flüssigkeit:

Lokales thermisches Gleichgewicht  $\longrightarrow$  hydrodynamische Beschreibung möglich

Systeme mit langreichweitigen Kräften:

Fluidbeschreibung möglich, wenn lokales thermisches Gleichgewicht.

In Sternen kann die Ansammlung von nuklearen Teilchen als Fluid behandelt werden. Die Dynamik wird bestimmt durch den Druck plus das von den Teilchen selbst erzeugte Gravitationspotential. Wenn Materie ionisiert und wärmeleitend, dann noch thermischen Druck und das selbst-konsistente elektromagnetische Feld zu berücksichtigen.

### Gravitationshydrodynamik

Beispiele der Anwendung: Struktur und Entwicklung von Sternen, pulsierende Sterne, Gravitationskollaps kalter, alter Sterne.

(Kernreaktionen, Strahlungsverlust, Konvektion)

### Magnetohydrodynamik - MHD

Beispiele: Solar Flares, Struktur der Magnetosphäre, Dynamoproblem der Erde(oder Planeten)

Probleme: stark nichtlinear, denn

Fluid produziert Felder  $\longleftrightarrow$  Felder wirken auf Fluid.

Hier nur prinzipielle Mechanismen, bei konkreten Problemen müssen zusätzliche Phänomene berücksichtigt werden ( Ionisation, Kernreaktion, Strahlungsmechanismen, Diffusionsprozesse etc.)

Einfachster Ansatz:

Langreichweitige Kräfte werden als zusätzliche Kraft eingeschlossen.

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\underline{\underline{P}} + \underline{F} \quad (94)$$

$\underline{\underline{P}}$  wurde hierbei als Tensor dargestellt, um den Effekt von Viskosität einzuschließen. Für nichtrelativistische gravitierende Systeme gilt

$$\underline{F} = \rho \underline{g} = -\rho \nabla \Phi \quad (95)$$

wobei  $\Phi$  das skalare Gravitationspotential ist, gegeben durch die Poisson-Gl.  $\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho$ .

Fundamentale Frequenzen: Advektion

$$\omega_v = v/L$$

Schallwellen

$$\omega_s = \sqrt{\gamma P / \rho} / L$$

Gravitationswellen

$$\omega_g = \sqrt{4\pi G \rho}$$

wobei  $L$  die charakteristische Länge des Systems ist.

Wellen können koppeln, z.B. Pulsare ( $\omega_s$  &  $\omega_g$ ).

Wenn Fluid makroskopisch elektromagnetisch neutral, dann ist die magnetische Kraft

$$\underline{F} = \frac{1}{c} \underline{j} \times \underline{B} \quad (96)$$

wobei  $B$  das magnetische Feld im Fluid und  $\underline{j} = \frac{c}{4\pi} \nabla \times \underline{B}$  die Flußdichte ist.

$$\underline{F} = -\nabla \left( \frac{B^2}{8\pi} \right) + \frac{1}{4\pi} (\underline{B} \nabla) \underline{B} \quad (97)$$

→ magnetischer Druck

Erhalt des magnetischen Flußes:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial B}{\partial t} + \nabla \times \underline{E} = 0$$

unter der Bedingung  $\nabla B = 0$ .  $E$  hängt von den speziellen Eigenschaften des leitenden Fluids ab.

Oft:

$$\underline{E} + \frac{1}{c} \underline{v} \times \underline{B} = \eta j,$$

wobei  $\eta$  der Widerstand ist.

→ zeitabhängige Glg. des magnetischen Feldes in dem Fluid

$$\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} - \nabla \times (\underline{v} \times \underline{B}) = -\nabla \times \frac{\eta c^2}{4\pi} (\nabla \times \underline{B}) \quad (98)$$

→ Alfvenwellen:  $\omega_A \sim L/v_A$ , wobei die Alfvingeschwindigkeit

$$v_A^2 = \frac{B^2}{4\pi\rho}.$$

Die MHD-Gleichungen sind dann in Eulerscher-Formulierung gegeben durch:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \rho \underline{v} \quad (99)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = -\nabla \left[ \rho \underline{v} \underline{v} + \left( \underline{P} + \frac{\underline{B}\underline{B}}{8\pi} \right) \underline{I} - \frac{\underline{B}\underline{B}}{4\pi} + \underline{V} \right] \quad (100)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} = -\nabla(\rho \epsilon \underline{v} + q) - P \nabla \underline{v} + \eta j^2 - \underline{V} : \nabla \underline{v} \quad (101)$$

und zusätzlich die Gleichung für die Erhaltung des magnetischen Flusses:

$$\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} = \nabla \times \left( \underline{v} \times \underline{B} - \frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla \times \underline{B} \right) \quad (102)$$

Resultat hängt stark von der relativen Größe der einzelnen Effekte ab (Reynoldszahl).

$$R_\nu = \frac{vL\rho}{\mu} \quad \text{viskos}$$

$$R_\kappa = \frac{vL\rho}{\kappa} \quad \text{w\u00e4rmeleitend}$$

$$R_\nu = \frac{4\pi vL}{\nu c^2} \quad \text{leitend}$$

Wenn Reynoldszahl gro\u00df ist der Effekt der Diffusion klein.

Das Gleichungssystem kann auch Lagrange formuliert werden:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \underline{v} = 0 \quad (103)$$

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\nabla \left( P + \frac{B^2}{8\pi} \right) + \nabla \left( \frac{\underline{B}\underline{B}}{4\pi} - \underline{V} \right) \quad (104)$$

$$\rho \frac{d\epsilon}{dt} = -P \nabla \underline{v} + \nabla \underline{q} + \eta j^2 - \underline{V} : \nabla \underline{v} \quad (105)$$

$$\frac{d\underline{B}}{dt} = -\underline{B}(\nabla \underline{v}) + (\underline{B}\nabla) \underline{v} + \frac{\eta c^2}{4\pi} \nabla^2 \underline{B} \quad (106)$$

## 1-dimensionale MHD

Eigenschaften der magnetohydrodynamischen Glg. \u00e4hnlich der hydrodynamischen Gleichungen (speziell in 1D, da Vektoreigenschaften von Magnetfeld keine Rolle spielt).

\u2192 alle numerischen HD-Methoden anwendbar auf MHD (Lax-Wendroff, Leap frog, Schemata 2.Ordnung)

F\u00fcr 1-D Fall und unter der Annahme eines idealen Gases erh\u00e4lt man in Euler-Darstellung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial x} - \rho \frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\frac{\partial(v)}{\partial t} = -v \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{B}{4\pi \rho} v \frac{\partial B}{\partial x}$$

$$\frac{\partial(p)}{\partial t} = v \frac{\partial p}{\partial x} - \gamma p \frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\frac{\partial(B)}{\partial t} = -v \frac{\partial B}{\partial x} - B \frac{\partial v}{\partial x}$$

Wenn man das Lax-Schema anwendet kann man ähnlich wie für HD ein Stabilitätskriterium für die numerische Lösung gewinnen:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{v_j^n + \sqrt{\frac{\gamma p_j^n}{\rho_j^n} + \frac{(B_j^n)^2}{4\pi \rho_j^n}}} \quad (107)$$

Diese Bedingung ist sehr ähnlich zur Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung, nur wird die Geschwindigkeit durch die Summe der Geschwindigkeit des massenmittelpunktes plus der magnetosonischen Geschwindigkeit ersetzt. Dieser zweite Anteil setzt sich aus der Schallgeschwindigkeit und der Alfven-Geschwindigkeit zusammen. Die Alfven-Geschwindigkeit resultiert aus dem magnetischen Druck.

Die Bedingung ist damit strenger als die Courant-Friedrichs-Lewy Bedingung.

Wesentlicher Unterschied zu HD: Es gibt Regionen sehr niedriger Flüssigkeitsdichte. Hier müßte man dann sehr kleine Zeitschritte anwenden. Um dies zu vermeiden behandelt man "Vakuumbereiche" anders.

Möglichkeiten der Behandlung von "Vakuumbereichen":

Vakuum kann keine Strom leiten  $\rightarrow$  elektromagnetische Gleichungen entkoppeln von Fluidgleichungen  $\rightarrow$  rein hydrodynamische Behandlung diese Bereichs.

## 6 Strahlungshydrodynamik

Anwendung: Sternentwicklung

(Energieerzeugung durch Kernreaktionen, Verlust durch Strahlung)

Sternatmosphären

Sternpulsation

Euler Glg. für selbstgravitierendes System mit Energiegewinn und Verlust

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot \rho \underline{v} \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} &= -\nabla(\rho v \underline{v}) - \underline{\nabla} P - \rho \nabla \Phi \\ \frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} &= -P \nabla \cdot \underline{v} - \nabla(\rho \epsilon \underline{v} + \underline{q}) + S\end{aligned}\quad (108)$$

wobei  $\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho$ ,  $q$  ist ein Energiediffusionsterm und  $S$  stellt einen Quellterm dar, der z.B. die Produktion von Energie durch Ionisationsprozesse, chem. Prozesse, Kernfusions- oder -spaltungsprozesse beschreibt.

Unterschiedliche Methoden um Strahlung zu behandeln:

- Jedes Volumenelement wird als neutrale Ansammlung von Elektronen, Ionen, Kernen und Protonen behandelt und für jede Sorte wird eine eigene Gleichung der inneren Energie aufgestellt.
- große Anzahl von Teilchen  $\rightarrow$  lokales thermisches Gleichgewicht der Teilchenarten untereinander

2. Fall wird folgendermaßen behandelt:

Die gesamte innere Energie ist die Summe über die inneren Energien jeder Teilchensorte. Die Relation der inneren Energie zum Druck und



der Dichte ist durch die (zum Teil recht komplexe) Zustandsgleichung gegeben

$$\epsilon = \epsilon(p, \rho)$$

Aus dem lokalen thermischen Gleichgewicht folgt für den Druck

$$p = p_r + p_e + p_i$$

wobei  $p_r$  der Strahlungsdruck,  $p_e$  der Elektronendruck,  $p_i$  der Ionen-  
druck ist.

### Strahlungstheorie

Strahlungsintensität  $I_\nu$ : Energiemenge pro Raumwinkel in Einheits-  
frequenz pro Zeiteinheit durch senkrecht stehende Fläche.

Spektrale Zerlegung in Frequenzen oder Wellenlängen:

$$I_\nu d\nu = I_\lambda d\lambda.$$

aus  $\nu = c/\lambda$  und  $d\nu = -(c/\lambda^2)d\lambda$  folgt

$$\nu I_\nu = \lambda I_\lambda \text{ oder } I_\lambda = \frac{c}{\lambda^2} I_\nu$$

Die Gesamtstrahlung ist:

$$I = \int_0^\infty I_\nu d\nu = \int_0^\infty I_\lambda d\lambda$$

und die über den Raumwinkel gemittelte Intensität

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi} \oint I_\nu d\Omega = \frac{1}{4\pi} \int \int I_\nu \sin\theta d\theta d\phi$$

mittlere Intensität der Gesamtstrahlung:  $J = \int_0^\infty J_\nu d\nu$ .

Jedes Strahlungsbündel transportiert nicht nur Energie sondern auch Impuls  $\rightarrow$  Strahlungsbündel übt Druck aus

$$p_r = \frac{1}{c} \oint I \cos^2 \theta d\Omega$$

(cos : senkrechte Komponente zählt).

Wenn man ein isotropes Strahlungsfeld annehmen kann, gilt:

$$p_r = \frac{1}{3c} \oint I d\Omega = \frac{4\pi}{3c} J$$

Emission:  $j_\nu d\nu dV d\Omega$   $j_\nu$  : Emissionskoeffizient

Absorption:  $\frac{dI_\nu}{ds} = -\kappa_\nu I_\nu$   $\kappa$  : Absorptionskoeffizient

Um Streuung aus Strahlrichtung zu berücksichtigen:  $k_\nu = \kappa_\nu + \sigma_\nu$ .

Transportgleichung:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -k_\nu I_\nu + j_\nu$$

Für nicht emittierende Schicht gilt:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -k_\nu I_\nu$$

Für die Intensität nach dem Durchgang durch diese Schicht gilt:

$$I_\nu = I_{\nu,0} \exp(-\tau_\nu)$$

wobei  $\tau_\nu = \int_0^s k_\nu ds$  die optische Dicke darstellt. Mit  $d\tau_\nu = k_\nu ds$  kann man Transportgleichung umschreiben

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_s} = -I_\nu + \frac{j_\nu}{k_\nu} = -I_\nu + S_\nu$$

wobei  $S_\nu = j_\nu/k_\nu$  die Quellfunktion ist.

Einfachste Annahme: Schwarzkörper-(Hohlraum)-strahlung

Intensität der Hohlraumstrahlung  $B_\nu(T)$  ist universelle Funktion

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}$$

Gesamtstrahlung:

$$B(T) = \int_0^\infty B_\nu(T) d\nu$$

Strahlungsstrom:

$$F^+ = \pi B(T) = \pi \int_0^\infty B_\nu(T) d\nu \longrightarrow \pi B(T) = \sigma T^4$$

Stefan-Boltzmann-Strahlungsgesetz, wobei  $\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^2}$ .

Entsprechender Strahlungsdruck

$$p_r = \frac{4}{3} \frac{\sigma T^4}{c}$$

wobei  $c$  die Lichtgeschwindigkeit ist. Strahlungstransport kann in Diffusionsterm  $\underline{q}$  beschrieben werden.

Energiefluß der Strahlung:

$$\underline{q} = \frac{\partial}{\partial \tau} (p_r c)$$

wobei  $\tau$  die optische Dicke,  $\partial \tau = -\kappa \rho d\underline{r}$  und  $\kappa$  die Opazität des Fluids ist.

$$\underline{q} = -\frac{16}{3} \frac{\sigma T^3}{\kappa \rho} \nabla T$$

Kernreaktionen, chem. Reaktionen etc. sind lokale Effekte  $\longrightarrow$  System von gewöhnlichen DGLs an jedem Gitterpunkt.

Beeinflussen Hydrodynamik durch Quellterm  $S$ .

Reaktionsraten hängen wiederum von Druck, Dichte, Temperatur und relativer Konzentration ab.

**Beispiel: Innere Struktur und Dynamik eines Sterns:**

1- dimensionale Behandlung - sphärische Symmetrie

(bedeutet:keine konvektiven Prozesse oder Turbulenz)

1-dimensional  $\rightarrow$  Lagrange Gitter, implizite Methoden

$r$  sei abhängige Variable,  $M$  unabhängige Variable

Radiale Schale:  $dr/dt = v$

$$M(r) = \int_0^r 4\pi s^2 \rho(s) ds$$

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{dM}{dt} = 0$$

$\rightarrow$  Masse in jeder Schicht ist konstant.

$$g = -\frac{\partial\Phi}{\partial r} = -\frac{GM}{r^2}$$

$\rightarrow$  Beschleunigungsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= -\frac{GM}{r^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \\ \frac{dv}{dt} &= \frac{GM}{dr^2} - 4\pi r^2 \frac{\partial p}{\partial M} \end{aligned}$$

$\rightarrow$  Energiegleichung

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\epsilon}{dt} &= -p \nabla \underline{v} - \nabla q + S \\ 1D \quad \frac{d\epsilon}{dt} &= -\frac{p}{\rho} \frac{dv}{dx} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{dx} q + \frac{S}{\rho} \\ \frac{d\epsilon}{dt} &= -p \frac{\partial p}{\partial M} (4\pi r^2 v) - \frac{\partial}{\partial M} (4\pi r^2 q) + \frac{S}{\rho} \end{aligned}$$

Damit hat man drei 1-dimensionale Glg. erster Ordnung erhalten, um den Sternaufbau zu bestimmen.

# 7 Übungen

## Übungen zu Computational Astrophysics

### 1. Aufgabe

Stellen Sie die Anfangsverteilung für eine Akkretionsscheibe der Ausdehnung 100 AE auf, um

1. eine hydrodynamische Simulation
2. eine Vielteilchensimulation

durchführen zu können. Es wird angenommen, daß die Teilchen sich mit Keplerscher Geschwindigkeit bewegen. Die Scheibe sei hinreichend dünn, daß eine 2-dimensionale Behandlung gerechtfertigt ist. Stellen Sie die Anfangsbedingungen für folgende Dichteverteilungen in der Scheibe her:

1.  $\rho = \text{const.}$
2.  $\rho = 1/r$
3.  $\rho = 1/r^2$

Für die Erzeugung der benötigten Zufallszahlen in Verteilungen 2) und 3) gibt es verschiedene Methoden:

Erzeugen von Zufallszahlen mit einer bestimmten Häufigkeit, Auswahlverfahren, Integrationsverfahren. Wenden Sie die entsprechenden Verfahren an.

## Übungen zu Computational Astrophysics

### 2. Aufgabe

Vergleichen Sie den Mittelwert und die Schwankung der Vielteilchenanfangsverteilung für die Dichteverteilungen

1)  $\rho = \text{const.}$

2)  $\rho = 1/r$

3)  $\rho = 1/r^2$

für Anzahl der Simulationsteilchen  $N = 1000, 5000, 10000, 20000$ . Wie verändert sich der Fehler mit steigender Teilchenzahl?

### 3. Aufgabe

Überlegen Sie welche allgemeine Struktur eine Vielteilchensimulation haben muß. Bereiten Sie die entsprechenden Programmteile vor.

## Übungen zu Computational Astrophysics

### 4. Aufgabe

Betrachten Sie das Keplerproblem bei dem ein Komet die Sonne umkreist. Es sollen nur die Kräfte zwischen der Sonne und dem Kometen betrachtet werden, alle anderen Kräfte (z.B. durch die Planeten, Sonnenwind) werden vernachlässigt.

Berechnen Sie die Bahn des Kometen unter Verwendung der

- Euler-Methode

$$v_{n+1} = v_n + \tau a_n$$

$$r_{n+1} = r_n + \tau v_n$$

- Euler-Cromer-Methode

$$v_{n+1} = v_n + \tau a_n$$

$$r_{n+1} = r_n + \tau v_{n+1}$$

- Rung-Kutta-Verfahren 4.Ordnung
- Verlet-Verfahrens
- Leap-Frog-Verfahrens

Berechnen Sie Positionen und Energien und stellen Sie sie graphisch da.

Als Anfangsbedingung wähle man einen Abstand von 1AE und eine Geschwindigkeit von  $2\pi$  AE pro Jahr. Der Zeitschritt sei 0.02 Jahre. Testen Sie auch den Fall eines Zeitschrittes von 0.005 Jahren.

### 5. Aufgabe

Man nehme an, daß ein Planet plötzlich all seine kinetische Energie verlöre. Als Konsequenz fiel er natürlich in die Sonne. Zeigen Sie, daß die Erde das Zentrum der Sonne in etwa 65 Tagen erreichen würde.

## Übungen zu Computational Astrophysics

### 6. Aufgabe

Bearbeiten Sie Aufgabe 4 unter Verwendung des

- Rung-Kutta-Verfahren 4.Ordnung
- Leap-Frog-Verfahrens
- Prädiktor-Korrektor-Verfahrens

Betrachten Sie das Keplerproblem bei dem ein Komet die Sonne umkreist. Es sollen nur die Kräfte zwischen der Sonne und dem Kometen betrachtet werden, alle anderen Kräfte (z.B. durch die Planeten, Sonnenwind) werden vernachlässigt. Berechnen Sie die Bahn des Kometen. Als Anfangsbedingung wähle man einen Abstand von 1AE und eine Geschwindigkeit von  $2\pi$  AE pro Jahr. Der Zeitschritt sei 0.02 Jahre. Teste auch den Fall eines Zeitschrittes von 0.005 Jahren. Führen Sie die gleiche Rechnung durch für eine Anfangsgeschwindigkeit von  $1\pi$  AE pro Jahr.

### 7. Aufgabe

Man nehme an, daß ein Planet plötzlich all seine kinetische Energie verlöre. Als Konsequenz fiel er natürlich in die Sonne. Zeigen Sie, daß die Erde das Zentrum der Sonne in etwa 65 Tagen erreichen würde.



## Übungen zu Computational Astrophysics

### 8. Aufgabe

a) Verwenden Sie die Anfangsverteilung der Akkretionsscheibe, um den Gleichgewichtszustand der Anfangsverteilung zu finden.

b) Implementieren Sie hierzu einen geeigneten Integrator.

c) Bestimmen Sie den optimalen Zeitschritt.

d) Bestimmen Sie die Änderung der Rechenzeit, wenn 100, 200, 500 und 1000 Teilchen zur Darstellung verwendet. Wie lange würde die Rechnung eine realistische Rechnung mit 100 000 Teilchen und 10 000 Zeitschritte dauern?

e) Wie gut ist die Energierhaltung in dem System?

- eine hydrodynamische Simulation
- eine Vielteilchensimulation

## Übungen zu Computational Astrophysics

### Aufgabe 9

Verwenden Sie eine Anfangsverteilung (z.B. Akkretionsscheibe) mit 100, 200, 500, 1000 Teilchen. Stellen Sie den Rechenzeitbedarf graphisch als Funktion der Teilchenzahl dar.

Verwenden Sie zur Simulations

1. eine direkte Teilchen-Teilchenmethode
2. einen hierarchischen Treecode

Wie lange würde eine realistische Rechnung mit 100 000 Teilchen und 10 000 Zeitschritte mit beiden Codes jeweils dauern?

Wie gut ist die Energierhaltung in dem System?

Anmerkung:

Verwenden Sie den hierarchischen Treecode von J.BARNES.

C-Version: <http://www.ifa.hawaii.edu/faculty/barnes/treecode/treeguide.html>

Fortran77 - Version: <ftp://hubble.ifa.hawaii.edu/pub/barnes/treecode/>

## Übungen zu Computational Astrophysics

### Aufgabe 10

Verwenden Sie eine Anfangsverteilung (z.B. Akkretionsscheibe) mit 200 Teilchen. Testen Sie auf Energieerhaltung. Bestimmen Sie die Gleichgewichtsenergie des Systems und den Fehler der Energieangabe. Zeigen Sie, daß durch das Bilden von Blöcken in der Fehlerbestimmung die Sättigung erreicht werden kann.

Führen Sie dies für verschiedene Integratoren (z.B. Verlet, Euler, Leap-frog) und unterschiedliche Algorithmen (Standard-Teilchen-Teilchen-Code, hierarchischer Treecode) durch.

## Übungen zu Computational Astrophysics

### Aufgabe 11

Die Diffusionsgleichung ist gegeben durch

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x, t) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x, t).$$

Zeigen Sie, daß

$$T_G(x, t) = \frac{1}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} \exp \left[ \frac{-(x - x_0)^2}{2\sigma^2(t)} \right] \quad (109)$$

Lösung der Diffusionsgleichung ist.

### Aufgabe 12

Zeigen Sie, daß die Lösung der Diffusionsgleichung für die Anfangsbedingung  $T(x, t = 0) = T_o(x)$  ( $-\infty < x < \infty$ )

$$T(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} T_o(x', t) T_G(x - x', t) dx'.$$

ist, wobei  $T_G$  definiert ist wie in Aufgabe 11.

## Übungen zu Computational Astrophysics

### Aufgabe 13

Lösen Sie die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x, t) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x, t).$$

mit dem “Forward Time Centered Space”-Schema (FTCS). Die Randbedingung ist, dass  $T_1^n = T_N^n = 0$  für alle Zeiten  $n$ . Als Anfangsbedingung wollen wir  $T(x, 0) = \delta(x)$  wählen. Die Deltafunktion wird numerisch repräsentiert durch

$$\Delta(x) = \begin{array}{ll} (x+h)/h^2 & \text{für } -h < x < 0 \\ (h-x)/h^2 & \text{für } 0 < x < h \\ 0 & \text{sonst} \end{array}$$

Diese Funktion ist eine Dreiecksfunktion mit einer Einheitsfläche.

Die Gaussfunktion wird sich gemäß  $\sigma(t) = \sqrt{2\kappa t}$  verbreitern. Die Zeit in der sich  $\sigma$  von 0 auf  $h$  ausdehnt ist

$$t_\sigma = \frac{h^2}{2\kappa}$$

Wahrscheinlich ist es nicht sinnvoll einen Zeitschritt größer als  $t_g$  zu wählen. Testen Sie dies!

## Übungen zu Computational Astrophysics

### Aufgabe 14

Testen Sie die Stabilität für das CTCS-Differenzenschema, CTCS = Centered Time Centered Space. Dieses Verfahren wird auch "Staggered Leapfrog"-Schema genannt.

### Aufgabe 15

Die Advektionsgleichung in einer Dimension ist gegeben durch

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} F(p)$$

Wenn  $p$  die Ladungsdichte ist, so ist  $F$  der Fluß . Hier behandeln wir den Fall  $F = ca(x, t)$ .

Man kann analytisch zeigen ,daß für eine Cosinus-modifiziertes Gauß -Profil

$$a(x, t = 0) = \cos \left[ k(x - x_0) \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right] \right]$$

als Anfangsbedingung die Lösung lautet

$$a(x, t) = \cos \left[ k((x - ct - x_0) \exp \left[ -\frac{((x - ct - x_0)^2}{2\sigma^2} \right] \right]$$

wobei  $x_0$  und  $\sigma$  Konstanten sind, die den Ort und die Breite des Peaks angeben,  $k$  ist die Wellenzahl der Modulation.

Lösen Sie die Advektionsgleichung mit

- dem FTCS-Schema
- der Lax-Methode
- dem Lax-Wendroff Schema

Was sind die Unterschiede?

## 8 Projekte