

HYBRIDE VERFAHREN ZUR SIMULATION DER WECHSELWIRKUNG RELATIVISTISCHER KURZPULS-LASER MIT HOCHDICHTEN PLASMEN



INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades der

Mathematischen-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Jalo Liljo

aus Düsseldorf

Januar 2010

Mathematisches Institut
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Gedruckt mit der Genehmigung der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referent: Prof. Dr. Marlis Hochbruck
Koreferent: Prof. Dr. Alexander Pukhov
Tag der mündlichen Prüfung:

HYBRIDE VERFAHREN ZUR SIMULATION DER WECHSELWIRKUNG RELATIVISTISCHER KURZPULS-LASER MIT HOCHDICHTEN PLASMEN

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit wird ein effizientes numerisches Verfahren zur Simulation der Wechselwirkung relativistischer Kurzpuls-Laser mit hochdichten Plasmen vorgestellt.

Die populärste Methode die Wechselwirkung von Lasern mit Plasmen zu simulieren, sind explizite particle-in-cell (PIC) Codes, weil sie die physikalischen Prozesse in Plasmen am detailliertesten beschreiben. Sie sind allerdings nicht für Plasmen mit sehr hohen Dichten geeignet, da einerseits sehr kleine Zeitschrittweiten und andererseits sehr viele Teilchen zur Darstellung des Plasmas gewählt werden müssen. Dies führt zu sehr hohem Rechenaufwand. Um solche Probleme zu simulieren, kann man das Plasma als Flüssigkeit auffassen und hydrodynamisch beschreiben, wodurch jedoch physikalische Eigenschaften verloren gehen, oder beide Modelle kombinieren. In dieser Arbeit wird ein neues hybrides Modell vorgestellt, welches eine hydrodynamische Beschreibung des hochdichten Plasmas mit der kinetischen Beschreibung des Plasmas mit niedriger Dichte kombiniert. Hauptziel dieser Arbeit ist die Entwicklung neuer numerischer Verfahren zur Simulation der Wechselwirkung relativistischer Kurzpuls-Laser mit hochdichten Plasmen, welche durch dieses Modell beschrieben werden.

Zunächst wird das zugrundeliegende physikalische Problem und Modell erklärt. Als Ausgangspunkt dient der bestehende PIC-Code VLPL (Virtual Laser Plasma Laboratory). Es wird in einem ersten Ansatz das Problem in einer Dimension betrachtet und ein neuer effizienter impliziter Code H-VLPL (Hybrid Virtual Laser Plasma Laboratory) entwickelt, welcher unabhängig von der Dichte stabil ist. Die numerische Dispersionsrelation des Verfahrens wird hergeleitet und abschließend wird es an physikalischen Anwendungen getestet. Allerdings muss ein lineares Gleichungssystem gelöst werden, wodurch der implizite Code an Effizienz verliert, wenn man ihn auf 3D erweitert.

Im zweiten Teil der Arbeit wird ein neuer Ansatz basierend auf exponentiellen Integratoren verwendet, der auch in 3D effizient ist. Dieser Ansatz wird zunächst in einer Dimension vorgestellt, um die Problemstellungen aufzuzeigen. Es wird die Stabilität von Orts- und Zeitdiskretisierung gezeigt und die numerische Dispersionsrelation hergeleitet. Numerische Experimente zeigen, dass der neue Zeitintegrator unabhängig von der Dichte die Ordnung zwei hat. Anschließend wird das Problem in zwei und drei Dimensionen betrachtet und ein, in Zusammenarbeit mit dem Institut für Theoretische Physik, in C++ implementierter neuer paralleler 3D Code H-VLPL vorgestellt, welcher die Möglichkeit bietet Plasmen mit beliebig hoher Dichte zu simulieren. Vergleiche mit VLPL zeigen, dass die wesentlichen physikalischen Eigenschaften von Laser-Plasma-Wechselwirkungen korrekt beschrieben werden, jedoch in deutlich kürzerer Rechenzeit. Abschließend wird auch der 3D Code H-VLPL an physikalisch relevanten Anwendungen in denen hohe Dichten auftreten getestet.

HYBRIDE VERFAHREN ZUR SIMULATION DER WECHSELWIRKUNG RELATIVISTISCHER KURZPULS-LASER MIT HOCHDICHTEN PLASMEN

ABSTRACT

In this thesis an efficient numerical algorithm for the simulations of relativistic short pulse laser interaction with high density plasmas is presented.

The most popular methods to describe laser plasma interactions are particle-in-cell (PIC) codes because they provide the most detailed description of plasmas. But they are not efficient for high density plasmas because in this case they have to use very small time steps and a high number of particles is needed which leads to high computational effort. To handle these applications one can use a fluid description of the plasma and treat it hydrodynamically, whereby one loses physical properties, or combine both models. In this thesis a new hybrid model is presented, which combines the hydrodynamic description of the high density plasma and the kinetic description of low density plasmas. The main goal of this thesis is the development of new numerical methods to simulate relativistic short pulse laser interaction with high density plasmas, which are described by this model.

First the physical model and the particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Laboratory) is explained. Then the problem is considered in one dimension and an efficient one-dimensional implicit code H-VLPL (Hybrid Virtual Laser Plasma Laboratory) is presented, which is unconditionally stable independent of the density. The numerical dispersion relation of the scheme is derived and finally it is applied on some well-known physical examples. But the efficiency drops if the code is extended to three dimensions, because linear systems arising from a three-dimensional discretization have to be solved.

Therefore a new approach based on exponential integrators is presented in the second part of the thesis. First the approach is considered in one dimension to understand the problems arising. The stability of the spacial and time discretization is showed and the numerical dispersion relation is derived. Numerical examples show that the numerical scheme is of order two independent of the density. Further the problem is considered in two and three dimensions and a new parallel 3D C++ Code H-VLPL is presented, which is developed in collaboration with the institut of theoretical physics and gives the opportunity to simulate plasmas of arbitrary density. Comparisons to the code VLPL show that H-VLPL describes the basic physical properties correctly, though with much less computational effort. Finally also the 3D Code is applied to some well-known physical examples.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Simulation von Laser-Plasma-Wechselwirkungen	2
2	Physikalisches Problem	5
2.1	VLPL	5
2.2	Hybrides Modell	9
3	1D elektromagnetischer, relativistischer PIC-hydrodynamischer Code H-VLPL	11
3.1	Numerisches Schema	13
3.2	Dispersionsrelation, Stabilität	18
3.2.1	Dispersionsrelation der x -Komponente	19
3.2.2	Dispersionsrelation der y - und z -Komponente	22
3.3	Physikalische Anwendungen	26
3.3.1	Reflektion und Brechung des Laserpulses	26
3.3.2	Energieerhaltung	27
3.3.3	Ionenbeschleunigung (TNSA)	27
3.3.4	Dämpfung in hochdichten Plasmen	30
3.3.5	Kollisionen von Teilchen	33
3.4	Fazit	35
4	Exkurs: Numerische Verfahren für hoch oszillatorische Dif- ferentialgleichungen mit konstanten hohen Frequenzen und Splitting -Methoden	36
4.1	Splitting-Methoden	36

4.2	Oszillatorische Differentialgleichungen mit konstanten hohen Frequenzen	39
5	Ein neuer Ansatz zur hybriden Simulation von Laser-Plasma-Wechselwirkungen	43
5.1	Splitting – Zeitdiskretisierung	44
5.2	1D	46
5.2.1	Wahl der Filter-Funktionen	54
5.2.2	Lokaler Fehler	59
5.3	2D	61
5.4	3D	65
5.5	Numerische Dispersionsrelation	69
5.6	Energieerhaltung über lange Zeiten	72
5.7	Physikalische Anwendungen – 3D Simulationen	74
5.7.1	Reflektion und Brechung des Laserpulses	74
5.7.2	Energieerhaltung	75
5.7.3	TNSA	75
5.7.4	Dämpfung in hochdichten Plasmen	78
5.7.5	Weibel-Instabilitäten	80
5.8	Fazit	82
	Literaturverzeichnis	84

1 Einleitung

1.1 Motivation

Der Sonderforschungsbereich Transregio 18 (Relativistische Laser-Plasma-Dynamik), an dem die Universitäten Düsseldorf, Jena und München beteiligt sind, untersucht die Physik von ultra-intensiver Laserinteraktion mit Materie. Die Hauptthemen sind die Erzeugung von Partikel- und harten Photonenstrahlen, die Untersuchung von neuen Zuständen der Materie und die Entwicklung eines neuen OPCPA Lasersystems. Das Teilprojekt B5 (Advanced numerical methods for simulations of relativistic short pulse laser interactions with high density plasmas, Fortgeschrittene numerische Methoden zur Simulation der Wechselwirkung relativistischer Kurzpuls-Laser mit hochdichten Plasmen), in dessen Rahmen diese Arbeit entstanden ist, beschäftigt sich mit der Computersimulation dieser Wechselwirkungen.

Erkenntnisse über solche Interaktionen finden an vielen Stellen Anwendungen [14]. Geladene Teilchen, etwa Ionen und Elektronen, werden in einem Teilchenbeschleuniger mittels elektrischer Felder auf hohe Geschwindigkeiten beschleunigt. Solche Geräte werden in verschiedenen Bereichen der Forschung, wie z.B. in der Materialwissenschaft, genutzt. Aber auch in der Medizin haben Teilchenbeschleuniger sowohl in der Diagnostik als auch in der Therapie zunehmende Bedeutung. Hier liefert die Laser-Plasma-Physik einen neuen Ansatz. Protonenstrahlen bieten eine neue Möglichkeit Krebs zu bekämpfen und werden bereits zur Behandlung eingesetzt. Der Vorteil dieser Therapie besteht darin, dass Protonenstrahlen den Tumor äußerst zielgenau treffen und damit das umliegende Gewebe besser schonen als die bisher in der Strahlentherapie verwendeten Röntgenstrahlen. So lassen sich sogar Tumore behandeln, die mit der Röntgentherapie nicht behandelbar waren, weil sie zu nah an lebenswichtigen Organen lagen.

Um Ionen auf hohe Geschwindigkeiten zu beschleunigen werden hochintensive Laserimpulse eingesetzt. Dadurch werden zunächst Elektronen beschleunigt, welche dann die Ionen auf hohe Geschwindigkeiten bringen. Diese Geräte sind herkömmlichen Teilchenbeschleunigern in einigen Punkten überlegen. Ein Nachteil war allerdings, dass Ionen mit sehr breiter Energieverteilung erzeugt wurden. 2006 gelang der Durchbruch Ionen mit stark reduzierter Energieverteilung zu erzeugen. In [14] wird beschrieben wie die leistungsstärksten und intensivsten Laserimpulse, die derzeit erzeugt werden können, auf dünne Folien fokussiert werden. Die Elektronen werden dann durch den Lichtdruck nach vorne gedrückt und treten auf der Rückseite wieder aus, dabei entstehen ho-

he elektrostatische Felder. In diesen Feldern werden die auf der Rückseite der Folie sitzenden Ionen beschleunigt. Die Ionen werden also nicht direkt durch den Laserstrahl beschleunigt, sondern durch die Elektronen, die durch die Laserenergie in einen Plasmazustand versetzt werden.

In dieser Arbeit wird ein effizientes numerisches Verfahren entwickelt, um die Wechselwirkung relativistischer Kurzpuls-Laser mit hochdichten Plasmen zu simulieren und damit besser zu verstehen. Der bestehende particle-in-cell (PIC) Code VLPL (Virtual Laser Plasma Laboratory) [29] wird mit einem hydrodynamischen Modell kombiniert und ein neuer Code H-VLPL (Hybrid Virtual Laser Plasma Laboratory) vorgestellt, welcher die Behandlung von hochdichten Plasmen ermöglicht. PIC-Codes haben sich zur Untersuchung von Laser-Plasma-Wechselwirkung durchgesetzt, weil sie die physikalischen Eigenschaften am detailliertesten beschreiben. Allerdings ist der Rechenaufwand bei hohen Dichten nicht mehr akzeptabel und bei einigen Anwendungen treten Dichten auf, die klassische PIC-Codes unanwendbar machen. Der neu entwickelte Code H-VLPL bietet die Möglichkeit Simulationen in wenigen Minuten oder Stunden durchzuführen, die unter gleichen Voraussetzungen theoretisch Jahre dauern würden.

1.2 Simulation von Laser-Plasma-Wechselwirkungen

In den letzten Jahren wurden einige elektromagnetische parallele 3D PIC-Codes wie VLPL [29], OSIRIS [6], VORPAL [28] und OOPIC [41] entwickelt. Das Interesse an physikalischen Prozessen in denen hochdichte Plasmen auftreten führt dazu, dass der Rechenaufwand dieser Codes immer größer wird. Daher werden neue Algorithmen und Modelle entwickelt, um Probleme behandeln zu können, welche sich mit einem PIC-Code nicht in akzeptabler Zeit simulieren lassen.

Einer der Hauptgründe warum die expliziten PIC-Codes sehr rechenaufwändig sind, ist dass die Zeitschrittweite τ von der Plasmafrequenz

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi\rho_e e^2}{m_e}}$$

abhängt, wobei ρ_e die Elektronendichte, m_e die Elektronenmasse und $-e$ die Ladung bezeichnet. Explizite PIC-Codes sind für

$$\tau \leq \frac{2}{\omega_p}$$

stabil und daher ineffizient, wenn man hochdichte Plasmen simulieren will. Es gibt aber einige wichtige Anwendungen in denen solche Plasmen von Interesse sind z.B. der Prozess von target normal sheath acceleration (TNSA) [34, 15, 20], wo die Beschleunigung von Ionen untersucht wird. Hierbei variiert die Dichte zwischen $100 - 1000 \rho_c$, wobei $\rho_c = m_e \omega^2 / 4\pi e^2$ für die sogenannte kritische Plasmadichte und ω für die Laserfrequenz steht. Ein weiteres wichtiges Anwendungsbeispiel ist das Fast Ignition-Konzept (FI) der Trägheitsfusion (Inertial Confinement Fusion (ICF)) [37]. FI Plasmen haben Dichten von bis zu $10^5 \rho_c$.

In den letzten Jahren ist zur Simulation von Anwendungen mit hochdichten Plasmen die Kombination von hydrodynamischen Modellen zur Beschreibung des hochdichten Plasmas und einer kinetischen Beschreibung des Plasmas mit niedriger Dichte betrachtet worden [27, 5, 9]. Die meisten dieser Codes verwenden Darwin-Approximationen und vernachlässigen daher die elektromagnetische Ausbreitung von Wellen vollständig. Weiterhin werden elektrostatische Wellen ausgeschlossen. Ein weiterer Code ist der implizite elektromagnetische PIC-Code LSP [44], welcher ein implizites globales Schema verwendet, welches zu keiner Schrittweitereinschränkung führt. Die elektromagnetischen Felder werden durch einen uneingeschränkt Courant stabilen Algorithmus [47] berechnet. In [32] wurde ein weiterer impliziter Code vorgestellt und zur Untersuchung von Kollisionsplasmen verwendet [33].

In dieser Arbeit wird ein neues hybrides Modell vorgestellt, welches die hydrodynamische Beschreibung des hochdichten Plasmas mit der kinetischen Beschreibung des Plasmas niedriger Dichte kombiniert. Ausgangspunkt ist der bestehende PIC-Code VLPL [29], welcher auf die Simulation von hochdichten Plasmen erweitert wird. Die Schrittweitereinschränkung des expliziten PIC-Codes führt bereits bei Dichten von z.B. $100\rho_c$ zu hohem Rechenaufwand. Die Kombination der hydrodynamischen und kinetischen Beschreibung ermöglicht es Verfahren zu entwickeln, die unabhängig von der Dichte stabil sind und dennoch die physikalischen Eigenschaften korrekt beschreiben. Damit sind zum einen Simulationen in deutlich kürzerer Rechenzeit und zum anderen von hochdichten Plasmen möglich.

Hierzu wurde zunächst das eindimensionale Problem betrachtet [26] und ein neuer impliziter 1D Code H-VLPL (Hybrid Virtual Laser Plasma Laboratory) entwickelt. Da ein lineares Gleichungssystem gelöst werden muss, verliert der implizite Code an Effizienz, wenn man ihn auf 3D erweitert. Daher wird dazu ein neuer Ansatz basierend auf exponentiellen Integratoren [17] verwendet. Exponentielle Integratoren verwenden die Exponentialfunktion oder verwandte Matrixfunktionen der Jacobimatrix der Differentialgleichung. Der Ansatz ba-

siert auf Splitting-Methoden, eine weit verbreitete Methode bei Problemen die auf unterschiedlichen Zeitskalen agieren. Es wurde ein durch die geglättete Implusmethode [7] motiviertes Verfahren und in Zusammenarbeit mit dem Institut für Theoretische Physik ein in C++ implementierter paralleler 3D Code H-VLPL entwickelt.

Die Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut. In Kapitel 2 wird das physikalische Problem, der Code VLPL und das hybride Modell erklärt. Dann wird in Kapitel 3 der implizite 1D Code H-VLPL vorgestellt und an einigen physikalisch relevanten Problemen getestet. In Kapitel 4 werden die Grundlagen zur Entwicklung der 3D Version erläutert, welche dann in Kapitel 5 vorgestellt und ebenfalls ausführlich getestet wird.

2 Physikalisches Problem

In diesem Kapitel zunächst kurz der zugrundeliegende Code VLPL (Virtual Laser Plasma Laboratory) [29] erläutert und anschließend ein hybrides Modell vorgestellt, welches ein hydrodynamisches Modell für hochdichte Plasmen und die volle kinetische Beschreibung heißer Elektronen und Ionen niedriger Dichte kombiniert.

2.1 VLPL

Der Code VLPL dient zur Simulation von Laser-Plasma-Experimenten in relativistischen Kurzpuls-Regimen auf modernen Parallelrechnern. Die Simulationsergebnisse liegen so nah an in der Realität gemessenen Ergebnissen, dass man von einem virtuellen Experiment redet, was natürlich nur der Fall ist, wenn man in 3D rechnet.

Plasma besteht aus sehr vielen einzelnen Teilchen, Elektronen und unterschiedlichen Arten von Ionen, welche untereinander interagieren. Der PIC-Code macht hier eine Vereinfachung, indem man eine Wolke von Teilchen als ein sogenanntes Makroteilchen zusammenfasst, in welchem sich alle Teilchen zusammen mit derselben Geschwindigkeit bewegen. Dies ist eine sehr naheliegende Vereinfachung und das so definierte Plasma wird dann auch numerisches Plasma genannt. Der Code simuliert die Wechselwirkungen elektromagnetisch und kinetisch, d.h. es werden die gesamten Maxwellgleichungen gelöst, welche in CGS-Einheiten durch

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \nabla \times \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{J} \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c \nabla \times \mathbf{E} \quad (2.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho \quad (2.1c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.1d)$$

gegeben sind. Dabei bezeichnet \mathbf{E} das elektrische Feld, \mathbf{B} das magnetische Feld, \mathbf{J} die Stromdichte, ρ die zugehörige Ladungsdichte und c die Lichtgeschwindigkeit. Elektrische Ladungen treten als Ladungsdichte und Stromdichte auf, wohingegen man von der Nichtexistenz magnetischer Ladungen ausgeht. Dies beschreibt Gleichung (2.1d): das \mathbf{B} Feld ist quellenfrei bzw. divergenzfrei. Die elektrischen und magnetischen Felder entstehen also aus (2.1a) und (2.1b) durch den Quellterm \mathbf{J} . Die drei Größen \mathbf{E} , \mathbf{B} und \mathbf{J} sind zeitabhängige Vek-

torfelder von der Form

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} V_x(t, x, y, z) \\ V_y(t, x, y, z) \\ V_z(t, x, y, z) \end{bmatrix}.$$

Aus dem Gauß'schen Gesetz (2.1c) und dem Faradayschen Gesetz (2.1a) erhält man die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.2)$$

Dies folgt, wenn man den Divergenzoperator $\nabla \cdot$ auf (2.1a) anwendet und anschließend (2.1c) einsetzt

$$0 = c \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{E} + 4\pi \nabla \cdot \mathbf{J} = 4\pi \frac{\partial}{\partial t} \varrho + 4\pi \nabla \cdot \mathbf{J}.$$

Wenn die Anfangsbedingungen die Kontinuitätsgleichung (2.2) erfüllen, ist (2.1c) automatisch während der kompletten Simulation erfüllt. (2.1d) ist ebenso immer erfüllt solange keine magnetischen Ladungen vorhanden sind und die Anfangsbedingungen die Gleichung erfüllen. Also reduziert sich das Problem auf die Gleichungen (2.1a) und (2.1b), sofern die Anfangsbedingungen (2.1c) und (2.1d) erfüllen, was im Folgenden vorausgesetzt sei.

Um den Quellterm \mathbf{J} zu definieren, muss man die Verteilungsfunktion kennen, welche die Positionen und Impulse eines aus N Teilchen bestehenden Plasmas angibt [30]. Sie beschreibt die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Anordnung im $6N$ -dimensionalen Phasenraum. Es wurde aber in [22] gezeigt, dass die Verteilungsfunktionen einzelner Teilchen ausreichen, um das gesamte System zu beschreiben. Wir bezeichnen im Folgenden mit \mathbf{x}_n den Ort und mit \mathbf{p}_n den Impuls des n -ten Teilchens.

Die Gleichung die die Entwicklung der Verteilungsfunktion $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ einzelner Teilchen beschreibt ist die sogenannte Boltzmann-Vlasov-Gleichung [3]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m\gamma} \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_p f = St.$$

Dabei bezeichnet m die Masse eines einzelnen Teilchens, \mathbf{F} die Kraft, $\gamma = \sqrt{1 + (p/mc)^2}$ den relativistischen Faktor und St den Kollisionsterm (Korrelation zwischen Teilchen). Sowohl analytisch als auch numerisch ist die Lösung der Boltzmann-Vlasov-Gleichung nicht trivial. Abhängig vom Ansatz ist die numerische Lösung sogar in einer Dimension mit sehr hohem Rechenaufwand

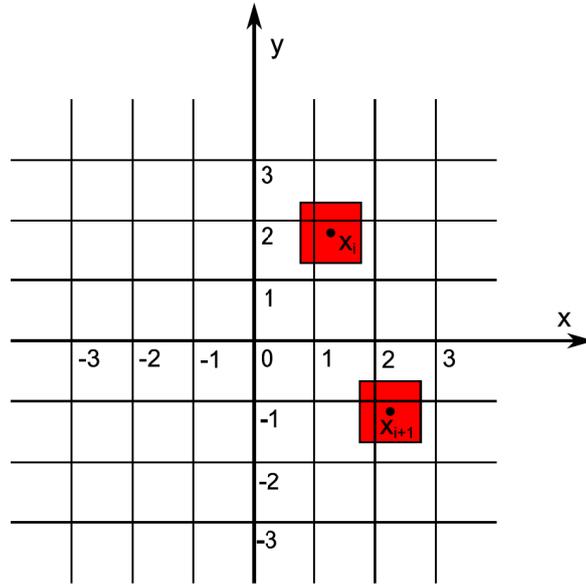


Abbildung 2.1: Zwei Makroteilchen auf einem zweidimensionalen Gitter.

verbunden. Eine Möglichkeit sind sogenannte Vlasov-Codes auf welche wir hier aufgrund des hohen Rechenaufwands nicht näher eingehen.

Eine andere Möglichkeit ist die Gleichung mittels finiter Elemente zu lösen, was auf die in PIC-Codes verwendete Technik führt. Man approximiert die Verteilungsfunktion mit sogenannten Finite-Phase-Fluid-Elementen (FPFE) [30]:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \sum_n W_n^{ph} S^{ph}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n, \mathbf{p} - \mathbf{p}_n),$$

wobei W_n^{ph} die Gewichtung und S^{ph} die Ansatzfunktion bezeichnen. VLPL verwendet einen 6 dimensionalen Hyperkubus:

$$S^{ph}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = 1, \quad |x_\alpha| \leq \frac{\Delta x_\alpha}{2}, \quad |p_\alpha| \leq \frac{\Delta p_\alpha}{2}, \quad \alpha = x, y, z.$$

Da der Phasenfluss die Verteilungsfunktion entlang der Charakteristiken der Boltzmann-Vlasov-Gleichung transportiert, muss der Schwerpunkt der FPFEs ebenfalls entlang der Charakteristiken fortbewegt werden

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_n}{dt} &= \frac{\mathbf{p}}{m\gamma}, \\ \frac{d\mathbf{p}_n}{dt} &= \mathbf{F} + \mathbf{F}_{st}, \end{aligned}$$

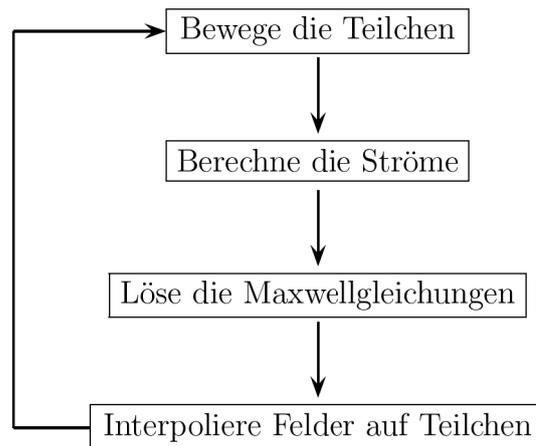


Abbildung 2.2: Zyklus eines Zeitschrittes des VLPL Codes

wobei \mathbf{F}_{st} die aus dem Kollisionsterm in der Boltzmann-Vlasov-Gleichung resultierende Kraft bezeichnet.

Auf diese Art und Weise werden nur die Bereiche behandelt, in denen sich auch Teilchen befinden. Des Weiteren hat das Gitter auf dem die Feldgleichungen (2.1a) und (2.1b) gelöst werden nur 3 Dimensionen und nicht 6 wie bei Vlasov-Codes.

Die Maxwellgleichungen werden auf einem Gitter gelöst und die Positionen der Makroteilchen werden in jedem Zeitschritt neu berechnet. Die Kräfte, die auf die Teilchen wirken und diese somit bewegen leben also auf den Gitterpunkten. Die Makroteilchen hingegen sind an einer beliebigen Stelle \mathbf{x} im Gebiet positioniert wie Abbildung 2.1 für zwei Makroteilchen auf einem zweidimensionalen Gitter veranschaulicht. Also müssen die Felder auf die Teilchenpositionen interpoliert werden. In jedem Zeitschritt durchläuft der Algorithmus den in Abbildung 2.2 dargestellten Zyklus. Zunächst werden die Bewegungsgleichungen für die Makroteilchen gelöst. Danach aus den Impulsen die Ströme berechnet, dann die Maxwellgleichungen gelöst und anschließend die Felder auf die Teilchenpositionen interpoliert.

Die Bewegungsgleichung der Teilchen werden mit dem expliziten Störmer-Verlet-Verfahren, welches in Kapitel 4 genauer erklärt wird, gelöst. Dies führt auf die Schrittweitenbeschränkung

$$\tau\omega_p \leq 2,$$

wobei τ die Schrittweite bezeichnet und ω_p die Plasmafrequenz. Dies hat, wie bereits in der Einleitung erläutert, sehr kleine Schrittweiten zur Folge, wenn

man Probleme mit hohen Dichten lösen will. Das im nächsten Abschnitt vorgestellte hybride Modell hilft dabei diese Einschränkung zu umgehen.

2.2 Hybrides Modell

Die Idee ist das kinetische Modell, welches im PIC-Code VLPL verwendet wird, zur Behandlung des Plasmas bis zu einer gewissen Dichtegrenze zu verwenden und das hochdichte Plasma hydrodynamisch, wie eine Flüssigkeit, zu behandeln. Dieser Ansatz ist beispielsweise auch in [27, 5, 9] betrachtet worden. Hier wird ein neues hybrides Modell vorgestellt. Eine grafische Anschauung der Kombination des hydrodynamischen Modells und der vollen kinetischen Beschreibung heißer Elektronen und Ionen niedriger Dichte ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Die Abbildung zeigt die Elektronendichte als Funktion der Ortsvariablen x . Der von links hereinkommende Laser trifft auf eine langsam anwachsende Plasmaschicht, bestehend aus kinetisch und hydrodynamisch behandelten Makroteilchen.

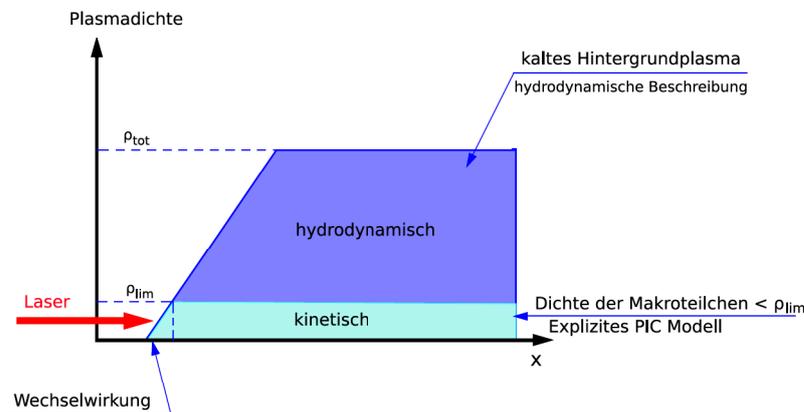


Abbildung 2.3: Schema des 1D Code H-VLPL. Plasma niedriger Dichte wird kinetisch beschrieben und mit expliziten PIC-Techniken behandelt. Das kalte und hochdichte Plasma im Hintergrund wird hydrodynamisch beschrieben.

Das Modell wird durch den folgenden Satz an Gleichungen beschrieben:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c \nabla \times \mathbf{B} - 4\pi \sum_{\ell} \mathbf{J}_{\ell}, \quad \ell = e, i, h \quad (2.3a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c \nabla \times \mathbf{E} \quad (2.3b)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_h}{dt} = q_e \mathbf{E} - \nu m_e \mathbf{v}_h \quad (2.3c)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_{\ell}}{dt} = q_{\ell} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}_{\ell}}{c} \times \mathbf{B} \right), \quad \ell = e, i, \quad (2.3d)$$

wobei

$$\mathbf{J}_{\ell} = q_{\ell} \rho_{\ell} \mathbf{v}_{\ell}, \quad \mathbf{p}_{\ell} = m_{\ell} \gamma_{\ell} \mathbf{v}_{\ell}, \quad \gamma_{\ell} = \sqrt{1 + \frac{p_{\ell}^2}{(m_{\ell} c)^2}}, \quad \nu = \eta \rho_h.$$

Dabei steht der Index $\ell = e, i, h$ für Elektronen, Ionen und hydrodynamisch behandelte Teilchen. ρ bezeichnet die Dichte der Teilchen und ν ist die Kollisionsfrequenz, welche die Leitfähigkeit des kalten Plasmas beschreibt.

Gleichungen (2.3a) und (2.3b) sind die Maxwellgleichungen, welche elektromagnetische Wellen vollständig beschreiben. Gleichung (2.3d) ist die kinetische Beschreibung der Elektronen und Ionen mit geringer Dichte.

Gleichung (2.3c) beschreibt die hybriden Teilchen, welche als quasineutrale Objekte aufgefasst werden, d.h. die negative Ladung der Elektronen wird durch die positive Ladung der Ionen vollständig ausgeglichen. Wir nehmen also an, dass die elektrostatische Kraft der hybriden Ionen so stark ist, dass die hybriden Elektronen nicht abgesondert werden können und die hybriden Teilchen sich somit als Ganzes bewegen. Allerdings können Elektronen in einem hybriden Teilchen einen Impuls \mathbf{p}_h haben und Ströme $\mathbf{J}_h = -e \rho_h \mathbf{v}_h$ erzeugen. Anders ausgedrückt sind die hybriden Teilchen nichts anderes als Stromträger. Diese Beschreibung des Plasmas entspricht dem single fluid MHD model in [22]. Da angenommen wird, dass die hybriden Elektronen sich langsam bewegen $\mathbf{v}_h \ll c$, wird die Lorentz Kraft $\mathbf{v}_h \times \mathbf{B}/c$ in (2.3c) vernachlässigt.

Die Dichte der kinetisch behandelten Teilchen auf den Gitterpunkten wird mittels der cloud-In-cell (CIC) Interpolationstechnik berechnet und die der hybriden Teilchen mittels der nearest-grid-point (NGP) Technik. Dies sind die beiden meist benutzten Techniken, um die Dichte auf den Gitterpunkten festzulegen [2, Kapitel 2-6].

3 1D elektromagnetischer, relativistischer PIC-hydrodynamischer Code H-VLPL

In diesem Kapitel wird ein erster eindimensionaler, relativistischer und hydrodynamischer hybrid Code, kombiniert mit dem PIC-Code VLPL [26] vorgestellt. Wir führen zunächst eine Variablentransformation durch, welche auch im Code VLPL enthalten ist, um dimensionslose Gleichungen zu erhalten. Dazu seien $\tilde{t} = \omega_0 t$ und $\tilde{x} = k_0 x$, wobei ω_0 die Laserfrequenz bezeichnet, $k_0 = \omega_0/c$ und

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{e\mathbf{E}}{m_e c \omega_0}, \quad \tilde{\mathbf{B}} = \frac{e\mathbf{B}}{m_e c \omega_0}, \quad \tilde{\mathbf{p}}_h = \frac{\mathbf{p}_h}{m_e c}, \quad \tilde{\mathbf{p}}_\ell = \frac{\mathbf{p}_\ell}{m_\ell c}, \quad \ell = e, i,$$

sowie

$$\tilde{\mathbf{J}}_\ell = \frac{\mathbf{J}_\ell}{j_c}, \quad j_c = e\rho_c c, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_c}, \quad \tilde{q}_\ell = \frac{q_\ell m_e}{e m_\ell}, \quad \tilde{\mathbf{v}}_\ell = \frac{\mathbf{v}_\ell}{c}, \quad \tilde{\nu} = \frac{\nu}{\omega_0}.$$

Im Folgenden lassen wir die Schlangen weg. Gleichung (2.3) ist dann äquivalent zu:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{B} - \sum_\ell \mathbf{J}_\ell, \quad \ell = e, i, h \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (3.1b)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_h}{dt} = -\mathbf{E} - \nu \mathbf{v}_h \quad (3.1c)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_\ell}{dt} = q_\ell (\mathbf{E} + \mathbf{v}_\ell \times \mathbf{B}), \quad \ell = e, i. \quad (3.1d)$$

Da wir das Problem in 1D betrachten haben alle Vektoren die Form

$$\mathbf{V} = [V_x(t, x), V_y(t, x), V_z(t, x)]^T \quad x \in [0, L]$$

und $\nabla \times \mathbf{V}$ ist durch

$$\nabla \times \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\partial}{\partial x} V_z \\ \frac{\partial}{\partial x} V_y \end{bmatrix}$$

gegeben.

Gleichung (3.1b) impliziert also, dass B_x konstant ist. Da im Ruhezustand keine magnetischen Felder initialisiert werden, ist $B_x(t, x) = 0$ und (3.1a)-(3.1c) reduziert sich auf

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = - \sum_{\ell} J_{x,\ell}, \quad \ell = e, i, h \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = - \frac{\partial B_z}{\partial x} - \sum_{\ell} J_{y,\ell}, \quad \ell = e, i, h \quad (3.2b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial B_y}{\partial x} - \sum_{\ell} J_{z,\ell}, \quad \ell = e, i, h \quad (3.2c)$$

$$\frac{\partial B_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (3.2d)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = - \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (3.2e)$$

$$\frac{dp_{h,\alpha}}{dt} = -E_{\alpha} - \nu v_{h,\alpha}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (3.2f)$$

Die Gleichungen für E_x und $p_{h,\alpha}$, $\alpha = x, y$ zusammen mit denen für E_y und B_z werden Y -Polarization genannt. Die für E_x und $p_{h,\alpha}$, $\alpha = x, z$ zusammen mit denen für E_z und B_y heißen Z -Polarization.

Zunächst definieren wir, um auszunutzen, dass die Lösung sich entlang der Charakteristiken ausbreitet, wie in [2, Kapitel 6-3]

$$F_y^{\pm} = \frac{1}{2}(E_y \pm B_z), \quad F_z^{\pm} = \frac{1}{2}(E_z \pm B_y). \quad (3.3)$$

Bezeichnen wir die Summe der vom PIC-Code berechneten Ströme mit $\mathbf{J} = \mathbf{J}_e + \mathbf{J}_i$, ist (3.2) äquivalent zu

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \rho_h v_{h,x} - \frac{1}{2} J_x \quad (3.4a)$$

$$\frac{dp_{h,x}}{dt} = -E_x - \eta \rho_h v_{h,x} \quad (3.4b)$$

$$\frac{\partial F_y^{\pm}}{\partial t} = \mp \frac{\partial F_y^{\pm}}{\partial x} + \frac{1}{2} \rho_h v_{h,y} - \frac{1}{2} J_y \quad (3.4c)$$

$$\frac{\partial F_z^{\pm}}{\partial t} = \pm \frac{\partial F_z^{\pm}}{\partial x} + \frac{1}{2} \rho_h v_{h,z} - \frac{1}{2} J_z \quad (3.4d)$$

$$\frac{dp_{h,y}}{dt} = -(F_y^+) + F_y^- - \eta \rho_h v_{h,y} \quad (3.4e)$$

$$\frac{dp_{h,z}}{dt} = -(F_z^+) + F_z^- - \eta \rho_h v_{h,z}. \quad (3.4f)$$

Im nächsten Abschnitt betrachten wir die Diskretisierung der Gleichungen.

3.1 Numerisches Schema

Zur Diskretisierung wählen wir ein äquidistantes geschachteltes Gitter in Zeit und Ort mit Ortsschrittweite $h = L/m$ und Zeitschrittweite $\tau > 0$. F_j^n , $j = 0, \dots, m$, $n \geq 0$ bezeichnet die Felder am Gitterpunkt j und zur Zeit $t_n = n\tau$. Die Felder werden entlang der Charakteristiken ($x \mp t = \text{const}$) integriert, wodurch $h = \tau$ impliziert wird. Diskretisiert werden nur die Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} , sowie die Impulse \mathbf{p}_h und \mathbf{p}_e . Die Ströme \mathbf{J}_h und die Geschwindigkeiten können dann durch $\mathbf{J}_h = -\rho_h \mathbf{p}_h / \gamma_h = -\rho_h \mathbf{v}_h$ berechnet werden. Abbildung 3.1 zeigt das geschachtelte Gitter und die jeweiligen Positionen der Variablen.

Den Laserpuls initialisieren wir als Anfangsbedingung

$$\begin{aligned} (E_{y,z})_j^0 &= a_0 \exp\left(\frac{-(x_j - x_c)^2}{2l^2}\right) \cos(x_j - x_c), & j = 1, \dots, m, \\ (B_{z,y})_{j+\frac{1}{2}}^0 &= a_0 \exp\left(\frac{-(x_{j+\frac{1}{2}} - x_c)^2}{2l^2}\right) \cos(x_j - x_c), & j = 0, \dots, m-1. \end{aligned}$$

Dabei ist a_0 die Amplitude des Lasers, k die Wellenzahl, l die Länge und x_c das Zentrum der Welle. Da wir in erster Linie nur an der Wechselwirkung des Laserpulses mit dem Plasma interessiert sind, wählen wir als Randbedingungen $E_{y,z}(t, 0) = E_{y,z}(t, L) = B_{z,y}(t, 0) = B_{z,y}(t, L) = 0$ durch welche der Laserpuls vom Rand reflektiert würde. In Kapitel 5 werden absorbierende Randbedingungen erklärt, wodurch der Laserpuls gedämpft wird, wenn er auf einen Rand des Simulationsgebiets trifft. Für (3.3) sind die Randbedingungen dann auch durch $F_y^+(0) = F_z^-(0) = F_y^-(L) = F_z^+(L) = 0$ gegeben. Man kann den Laserpuls aber genauso gut durch Randbedingungen in das Simulationsgebiet hereinkommen lassen und die Anfangsbedingungen auf Null setzen. Dann wählt man inhomogene zeitabhängige Dirichlet Randbedingungen und setzt $F_y^+(0) = F_z^-(0) = g(t)$ mit

$$g(t) = a_0 \exp\left(-\frac{(k(x - x_c) - \omega t)^2}{2l^2}\right) \cos(k(x - x_c) - \omega t),$$

wobei ω die Frequenz ist, sowie $F_y^-(L) = F_z^+(L) = 0$.

Motiviert durch [2, Kapitel 6-3] verwenden wir folgendes implizite finite Diffe-

renzenschema zur Lösung von (3.4):

$$\frac{(E_x)_j^{n+1} - (E_x)_j^n}{\tau} = (\rho_h v_{h,x})_j^{n+\frac{1}{2}} - (J_x)_j^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.5a)$$

$$\frac{(p_{h,x})_j^{n+1} - (p_{h,x})_j^n}{\tau} = -\frac{(E_x)_j^{n+1} + (E_x)_j^n}{2} - \eta(\rho_h v_{h,x})_j^{n+1} \quad (3.5b)$$

$$\frac{(F_y^+)_{j+1}^{n+1} - (F_y^+)_{j+1}^n}{\tau} = -\frac{(F_y^+)_{j+1}^n - (F_y^+)_j^n}{h} + \frac{1}{2}(\rho_h v_{h,y})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(J_y)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.5c)$$

$$\frac{(F_y^-)_j^{n+1} - (F_y^-)_j^n}{\tau} = \frac{(F_y^-)_{j+1}^n - (F_y^-)_j^n}{h} + \frac{1}{2}(\rho_h v_{h,y})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(J_y)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.5d)$$

$$\frac{(p_{h,y})_j^{n+1} - (p_{h,y})_j^n}{\tau} = -\frac{(F_y^+)_{j+1}^{n+1} + (F_y^+)_j^n + (F_y^-)_j^{n+1} + (F_y^-)_j^n}{2} - \eta(\rho_h v_{h,y})_j^{n+1} \quad (3.5e)$$

$$\frac{(F_z^+)_{j+1}^{n+1} - (F_z^+)_{j+1}^n}{\tau} = \frac{(F_z^+)_{j+1}^n - (F_z^+)_j^n}{h} + \frac{1}{2}(\rho_h v_{h,z})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(J_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.5f)$$

$$\frac{(F_z^-)_{j+1}^{n+1} - (F_z^-)_{j+1}^n}{\tau} = -\frac{(F_z^-)_{j+1}^n - (F_z^-)_j^n}{h} + \frac{1}{2}(\rho_h v_{h,z})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(J_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.5g)$$

$$\frac{(p_{h,z})_j^{n+1} - (p_{h,z})_j^n}{\tau} = -\frac{(F_z^+)_{j+1}^{n+1} + (F_z^+)_j^n + (F_z^-)_j^{n+1} + (F_z^-)_j^n}{2} - \eta(\rho_h v_{h,z})_j^{n+1}. \quad (3.5h)$$

Dabei wird hier der relativistische Faktor γ_h explizit behandelt und wir approximieren

$$(\rho_h v_{h,x})_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(\zeta_h)_j^n}{2} ((p_{h,x})_j^{n+1} + (p_{h,x})_j^n) \quad (3.6a)$$

$$\begin{aligned} (\rho_h v_{h,s})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{(\zeta_h)_j^n}{4} ((p_{h,s})_j^{n+1} + (p_{h,s})_j^n) \\ &\quad + \frac{(\zeta_h)_{j+1}^n}{4} ((p_{h,s})_{j+1}^{n+1} + (p_{h,s})_{j+1}^n), \quad s = y, z \end{aligned} \quad (3.6b)$$

$$(\rho_h v_{h,s})_j^{n+1} = (\zeta_h)_j^n (p_{h,s})_j^{n+1}, \quad s = x, y, z, \quad (3.6c)$$

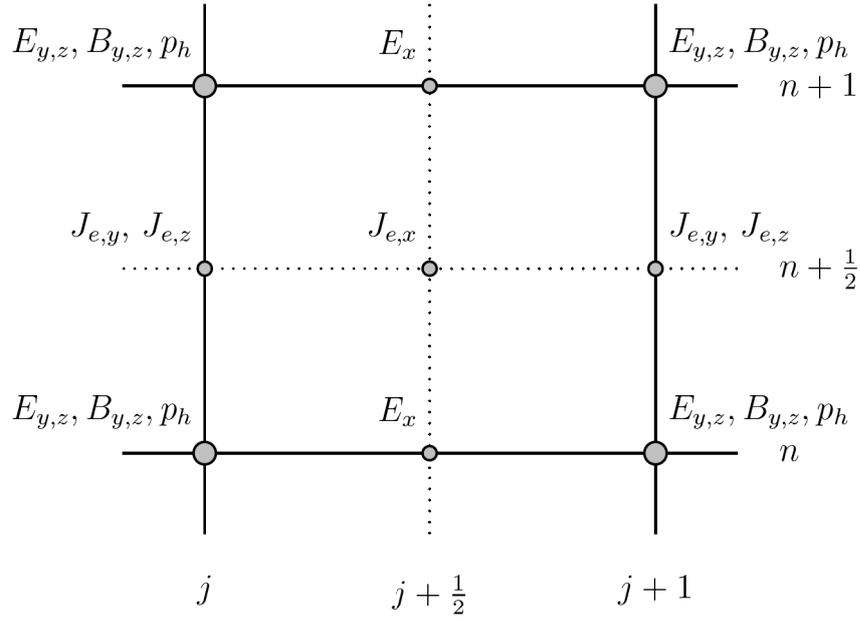


Abbildung 3.1: Geschachteltes Gitter für das finite Differenzschema (3.5).

wobei $\zeta_h = \rho_h/\gamma_h$. Hieraus ergibt sich folgendes Schema für die x -Komponente:

$$(E_x)_j^{n+1} = \frac{1}{(K^+)_j^n} \left((K^-)_j^n (E_x)_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_j^n (p_{h,x})_j^n}{2} \left(1 + \frac{1}{1 + \tau\eta(\zeta_h)_j^n} \right) - \tau(J_x)_j^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (3.7a)$$

$$(p_{h,x})_j^{n+1} = \frac{(p_{h,x})_j^n - \frac{\tau}{2} ((E_x)_j^{n+1} + (E_x)_j^n)}{1 + \tau\eta(\zeta_h)_j^n}, \quad (3.7b)$$

mit

$$K^\pm = 1 \pm \frac{\tau^2 \zeta_h}{4(1 + \tau\eta\zeta_h)}.$$

Weiterhin erhalten wir für die y -Komponente das implizite Schema

$$\begin{aligned} (F_y^+)_{j+1}^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,y})_j^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,y})_{j+1}^{n+1} \\ = (F_y^+)_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,y})_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,y})_{j+1}^n - \frac{\tau}{2}(J_y)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.8a)$$

$$\begin{aligned} (F_y^-)_{j+1}^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,y})_j^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,y})_{j+1}^{n+1} \\ = (F_y^-)_{j+1}^n + \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,y})_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,y})_{j+1}^n - \frac{\tau}{2}(J_y)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.8b)$$

$$\begin{aligned} (1 + \tau\eta(\zeta_h)_j^n)(p_{h,y})_j^{n+1} + \frac{\tau}{2}(F_y^+)_{j+1}^{n+1} + \frac{\tau}{2}(F_y^-)_{j+1}^{n+1} \\ = (p_{h,y})_j^n - \frac{\tau}{2}(F_y^+)_j^n - \frac{\tau}{2}(F_y^-)_j^n. \end{aligned} \quad (3.8c)$$

Zur Lösung dieses linearen Gleichungssystems definieren wir

$$Y = [(F_y^+)_{j=1}, \dots, (F_y^+)_{j=m}, (F_y^-)_{j=0}, \dots, (F_y^-)_{j=m-1}, (p_{h,y})_{j=0}, \dots, (p_{h,y})_{j=m}]^T$$

und erhalten, mit $A = A^n$ und $B = B^n$, ein Gleichungssystem der Form

$$AY^{n+1} = BY^n + f(t). \quad (3.9)$$

Die zeitabhängige Funktion f enthält die Randbedingungen sowie die vom PIC-Code berechneten Ströme. Weiterhin sind

$$A = \left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & D \\ \hline C & G \end{array} \right] \quad \text{und} \quad B = \left[\begin{array}{cc|c} S_m^T & 0 & -D \\ 0 & S_m & \\ \hline -C & & I_{m+1} \end{array} \right].$$

Dabei bezeichnen I_k die $k \times k$ Einheitsmatrix, $G = \text{diag}(1 + \tau\eta(\zeta_h)_j^n) \in \mathbb{R}^{(m+1) \times (m+1)}$ und S_k die $k \times k$ Shiftmatrix mit Einsen auf der ersten oberen Nebendiagonalen und Nullen sonst. Die Matrizen $C \in \mathbb{R}^{(m+1) \times 2m}$ und $D \in \mathbb{R}^{2m \times (m+1)}$ sind durch

$$C = \frac{\tau}{2} \left[\begin{array}{c|c} 0 & I_m \\ \hline I_m & 0 \end{array} \right], \quad D = -\frac{\tau}{8} \left[\begin{array}{c} \text{bidiag}((\zeta_h)_j^n, (\zeta_h)_{j+1}^n)_{j=0}^{m-1} \\ \text{bidiag}((\zeta_h)_j^n, (\zeta_h)_{j+1}^n)_{j=0}^{m-1} \end{array} \right],$$

gegeben, wobei $\text{bidiag}(a_j, b_j)_{j=1, m}$ eine $m \times (m+1)$ Bidiagonalmatrix mit a_j als j -tem Diagonaleintrag und b_j als j -tem oberen Diagonaleintrag bezeichnet.

Dieses große lineare System lässt sich mittels Block Gaußelimination effizient lösen. Betrachtet man die Block LR-Zerlegung der Matrix A

$$A = \left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & D \\ \hline C & G \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & 0 \\ \hline C & I_{m+1} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & D \\ \hline 0 & T \end{array} \right],$$

wobei $T = G - CD$, das Schurkomplement der Matrix A , eine Tridiagonalmatrix ist, sieht man, dass sich die Lösung des Gleichungssystems der Dimension $3m + 1$ auf die Lösung eines tridiagonalen Gleichungssystems der Dimension $m + 1$ und eine Matrix-Vektor-Multiplikation mit einer dünn besetzten Matrix reduziert. Schreiben wir

$$\left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & 0 \\ \hline C & I_{m+1} \end{array} \right] \underbrace{\left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & D \\ \hline 0 & T \end{array} \right] \begin{bmatrix} x \\ z \end{bmatrix}}_{=:\begin{bmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{z} \end{bmatrix}} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix},$$

so gilt $\tilde{x} = u$ sowie $\tilde{z} = v - Cu$ und mit

$$\left[\begin{array}{c|c} I_{2m} & D \\ \hline 0 & T \end{array} \right] \begin{bmatrix} x \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{z} \end{bmatrix},$$

folgt $x = \tilde{x} - Dz = u - Dz$ und $Tz = \tilde{z} = v - Cu$. Also ist es zur Lösung von (3.9) ausreichend $Tz = v - Cu$ zu lösen und anschließend $x = u - Dz$ zu berechnen.

Zunächst berechnen wir die rechte Seite

$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = BY^n + f(t) = BY^n + \begin{bmatrix} (F_y^+)_0^n - \frac{\tau}{2}(J_y)_{\frac{1}{2}}^n \\ -\frac{\tau}{2}(J_y)_{\frac{3}{2}}^n \\ \vdots \\ -\frac{\tau}{2}(J_y)_{m-\frac{1}{2}}^n \\ -\frac{\tau}{2}(J_y)_{\frac{1}{2}}^n \\ \vdots \\ -\frac{\tau}{2}(J_y)_{m-\frac{1}{2}}^n \\ \frac{\tau}{2}((F_y^+)_0^n + (F_y^+)_0^{n+1}) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

sowie $q = v - Cu$ und $T = G - CD$. $Tz = q$ kann effizient mit der LDU -Zerlegung der Matrix T gelöst werden. Daraus erhalten wir $x = u - Dz$ und damit die Lösung $Y = \begin{bmatrix} x \\ z \end{bmatrix}$.

Das Schema für die z -Komponente ist durch

$$\begin{aligned} (F_z^+)_j^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,z})_j^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,z})_{j+1}^{n+1} \\ = (F_z^+)_{j+1}^n + \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,z})_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,z})_{j+1}^n - \frac{\tau}{2}(J_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.10a)$$

$$\begin{aligned} (F_z^-)_{j+1}^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,z})_j^{n+1} - \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,z})_{j+1}^{n+1} \\ = (F_z^-)_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_j^n}{8}(p_{h,z})_j^n + \frac{\tau(\zeta_h)_{j+1}^n}{8}(p_{h,z})_{j+1}^n - \frac{\tau}{2}(J_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.10b)$$

$$\begin{aligned} (1 + \tau\eta(\zeta_h)_j^n)(p_{h,z})_j^{n+1} + \frac{\tau}{2}(F_z^+)_j^{n+1} + \frac{\tau}{2}(F_z^-)_j^{n+1} \\ = (p_{h,z})_j^n - \frac{\tau}{2}(F_z^+)_j^n - \frac{\tau}{2}(F_z^-)_j^n \end{aligned} \quad (3.10c)$$

gegeben und wird analog zu dem für die y -Komponente gelöst.

Im nächsten Abschnitt wollen wir die Stabilität dieses Verfahrens betrachten. Hierzu werden wir die numerische Dispersionsrelation herleiten. Allgemein versteht man in der Physik unter Dispersion die Abhängigkeit einer Größe von der Wellenlänge. Hier untersuchen wir die Abhängigkeit der Frequenz ω von der Kreiswellenzahl k .

3.2 Dispersionsrelation, Stabilität

In diesem Abschnitt werden wir die numerische Dispersionsrelation für das hybride Schema (3.5), angewandt auf die dimensionslosen Gleichungen (3.1), herleiten.

Um die numerische Dispersionsrelation zu erhalten, setzt man sogenannte ebene Wellen in die diskretisierten Gleichungen ein, welche allgemein folgende Form haben:

$$V_j^n = V_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)}. \quad (3.11)$$

In dimensionslosen Variablen ist die Plasmafrequenz durch

$$\tilde{\omega}_\ell = \omega_\ell / \omega_0 = \sqrt{\tilde{\rho}_\ell}, \quad \ell = e, h, \quad (3.12)$$

gegeben. Wir lassen wieder die Schlange weg, setzen $\gamma_\ell = 1$ und $\rho_\ell = \text{const}$. Es sei noch einmal wiederholt, dass das explizite PIC-Schema für Schrittweiten

$$\tau \leq \frac{2}{\omega_e} \quad (3.13)$$

stabil ist. In unserem Modell ist $\omega_e \ll \omega_h$ so, dass diese Schrittweitereinschränkung für die mit dem PIC-Code behandelten Teilchen kein Problem darstellt. Zunächst betrachten wir die Dispersionsrelation der x -Komponente.

3.2.1 Dispersionsrelation der x -Komponente

Aufgrund von $B_x(t, x) = 0$ haben wir

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \rho_h \mathbf{p}_h + \rho_e \mathbf{p}_e \quad (3.14a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_h}{dt} = -\mathbf{E} - \nu \mathbf{v}_h \quad (3.14b)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_e}{dt} = -\mathbf{E}. \quad (3.14c)$$

Zur Herleitung der Dispersionsrelation für die x -Komponente setzen wir in das finite Differenzenschema von (3.14)

$$\begin{aligned} \frac{(E_x)_j^{n+1} - (E_x)_j^n}{\tau} &= \rho_h \frac{(p_{h,x})_j^{n+1} + (p_{h,x})_j^n}{2} + \rho_e (p_{e,x})_j^{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{(p_{h,x})_j^{n+1} - (p_{h,x})_j^n}{\tau} &= -\frac{(E_x)_j^{n+1} + (E_x)_j^n}{2} - \eta \rho_h (p_{h,x})_j^{n+1} \\ \frac{(p_{e,x})_j^{n+\frac{1}{2}} - (p_{e,x})_j^{n-\frac{1}{2}}}{\tau} &= -(E_x)_j^n \end{aligned}$$

die ebenen Wellen

$$\begin{aligned} (E_x)_j^n &= E_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)}, \\ (p_{h,x})_j^n &= (p_h)_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)}, \\ (p_{e,x})_j^n &= (p_e)_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)} \end{aligned}$$

ein und mit (3.12) folgt

$$\begin{aligned} E_0(e^{i\omega\tau} - 1) &= \frac{\tau\omega_h^2}{2}(p_h)_0(e^{i\omega\tau} + 1) + \tau\omega_e^2(p_e)_0 e^{i\frac{\omega\tau}{2}}, \\ (p_h)_0(e^{i\omega\tau} - 1) &= -\frac{\tau}{2}E_0(e^{i\omega\tau} + 1) - \tau\eta\omega_h^2(p_h)_0 e^{i\omega\tau} \\ (p_e)_0(e^{i\frac{\omega\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}}) &= -\tau E_0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Unter Ausnutzung der Identitäten für die komplexwertige Exponentialfunktion erhalten wir damit

$$iE_0 \sin \frac{\omega\tau}{2} = \frac{\tau\omega_h^2}{2}(p_h)_0 \cos \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\tau\omega_e^2}{2}(p_e)_0, \quad (3.16a)$$

$$i(p_h)_0 \sin \frac{\omega\tau}{2} = -\frac{\tau}{2}E_0 \cos \frac{\omega\tau}{2} - \frac{\tau\eta\omega_h^2}{2}(p_h)_0 e^{i\frac{\omega\tau}{2}}, \quad (3.16b)$$

$$2i(p_e)_0 \sin \frac{\omega\tau}{2} = -\tau E_0. \quad (3.16c)$$

Lösen wir nun (3.16b) nach $(p_h)_0$, (3.16c) nach $(p_e)_0$ auf und setzen dies in (3.16a) ein, ergibt sich

$$\sin^2 \frac{\omega\tau}{2} = \left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2 \frac{\cos^2 \frac{\omega\tau}{2} \sin \frac{\omega\tau}{2}}{\sin \frac{\omega\tau}{2} - i\frac{\tau\eta\omega_h^2}{2} e^{i\frac{\omega\tau}{2}}} + \left(\frac{\tau\omega_e}{2}\right)^2. \quad (3.17)$$

Woraus wir für $\eta = 0$

$$\omega = \frac{2}{\tau} \arccos \sqrt{\frac{1 - \left(\frac{\tau\omega_e}{2}\right)^2}{1 + \left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2}} \quad (3.18)$$

erhalten. Die numerische Dispersionsrelation (3.18) zeigt, dass das Schema für Schrittweiten (3.13) stabil ist, unabhängig von ω_h . Es tritt die zu erwartende Schrittweitereinschränkung aus dem expliziten PIC-Modell auf, welche aber keine wirkliche Einschränkung für das hybride Modell bedeutet, da das Modell gerade für Problemstellungen mit $\omega_e \ll \omega_h$ gedacht ist. Für $\eta \neq 0$, ist die Stabilitätsanalyse weitaus schwieriger, da komplexe Koeffizienten in (3.18) auftreten, was in der Regel zu komplexwertigen Lösungen ω führt.

Definieren wir $\epsilon := e^{i\omega\tau}$ erhalten wir aus (3.15)

$$\epsilon - 1 = -\left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2 \frac{(\epsilon + 1)^2}{\epsilon - 1 + \tau\eta\omega_h^2\epsilon} - \tau^2\omega_e^2 \frac{\epsilon}{\epsilon - 1}$$

und damit ein Polynom dritten Grades in ϵ

$$\begin{aligned} & \left(\tau\eta\omega_h^2 + \left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2 + 1\right) \epsilon^3 - \left(2\tau\eta\omega_h^2 - (\tau\eta\omega_h^2 + 1)\tau^2\omega_e^2 + 3 - \left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2\right) \epsilon^2 \\ & + \left(\tau\eta\omega_h^2 - \left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2 - \tau^2\omega_e^2 + 3\right) \epsilon - \left(\frac{\tau\omega_h}{2}\right)^2 - 1 = 0. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die Lösung bleibt genau dann beschränkt, wenn $|\epsilon| \leq 1$. Abbildung 3.2 zeigt die Nullstellen in der komplexen Ebene und einen logarithmischen Plot der

Funktion $1 - |\epsilon|$ für alle Nullstellen von (3.19) für drei unterschiedliche Werte von η . In allen Fällen ist $1 - |\epsilon| \geq 0$ und alle Nullstellen liegen im Einheitskreis. Somit ist das Schema für die angegebenen Parameter stabil. Als Parameter wurden $\eta = 0.1, 0.4$ und 1 , sowie $\omega_e = 10$, $\omega_h = 1000$ und $\tau \in [0, \frac{2}{\omega_e}]$ gewählt.

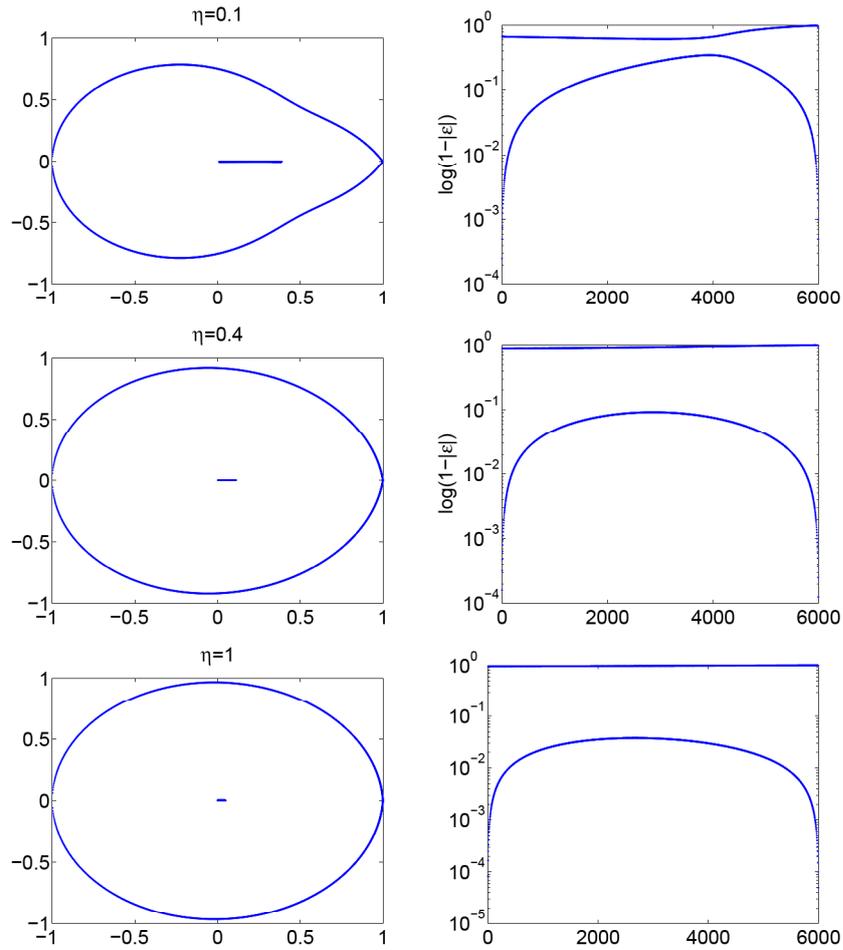


Abbildung 3.2: Nullstellen von (3.19) für drei unterschiedliche Werte von η und logarithmischer Plot der Funktion $1 - |\epsilon|$. Mit $\eta = 0.1, 0.4$ und 1 , sowie $\omega_e = 10$, $\omega_h = 1000$ und $\tau \in [0, \frac{2}{\omega_e}]$.

3.2.2 Dispersionsrelation der y - und z -Komponente

Die Gleichungen für die y -Komponente sind durch

$$\frac{\partial F_y^+}{\partial t} = -\frac{\partial F_y^+}{\partial x}x + \frac{1}{2}\rho_h p_{h,y} - \frac{1}{2}J_y \quad (3.20a)$$

$$\frac{\partial F_y^-}{\partial t} = \frac{\partial F_y^-}{\partial x}x + \frac{1}{2}\rho_h p_{h,y} - \frac{1}{2}J_y \quad (3.20b)$$

$$\frac{dp_{h,y}}{dt} = -(F_y^+ + F_y^-) - \eta\rho_h p_{h,y} \quad (3.20c)$$

$$\frac{dp_{e,y}}{dt} = -E_y \quad (3.20d)$$

gegeben und das finite Differenzenschema durch

$$(F_y^+)_{j+1}^{n+1} - (F_y^+)_{j+1}^n = -(F_y^+)_{j+1}^n + (F_y^+)_{j+1}^n + \frac{\tau}{2}\rho_h(p_{h,y})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2}(J_y)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.21a)$$

$$(F_y^-)_{j+1}^{n+1} - (F_y^-)_{j+1}^n = (F_y^-)_{j+1}^n - (F_y^-)_{j+1}^n + \frac{\tau}{2}\rho_h(p_{h,y})_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2}(J_y)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.21b)$$

$$(p_{h,y})_{j+1}^{n+1} - (p_{h,y})_{j+1}^n = -\frac{\tau}{2}((F_y^+)_{j+1}^{n+1} + (F_y^+)_{j+1}^n + (F_y^-)_{j+1}^{n+1} + (F_y^-)_{j+1}^n) - \tau\eta\rho_h(p_{h,y})_{j+1}^{n+1} \quad (3.21c)$$

$$(p_{e,y})_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - (p_{e,y})_{j+1}^{n-\frac{1}{2}} = -\tau(E_y)_{j+1}^n. \quad (3.21d)$$

Um die Dispersionsrelation zu erhalten, betrachten wir Gleichung (3.21) für die ursprünglichen Felder E und B :

$$(E_y)_{j+1}^{n+1} - (E_y)_{j+1}^n = -(B_z)_{j+1}^{n+1} + (B_z)_{j+1}^n + \tau\omega_h^2 \frac{(p_{h,y})_{j+1}^{n+1} + (p_{h,y})_{j+1}^n + (p_{h,y})_{j+1}^{n+1} + (p_{h,y})_{j+1}^n}{4} + \tau\omega_e^2 \frac{(p_{e,y})_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} + (p_{e,y})_{j+1}^{n+\frac{1}{2}}}{2} \quad (3.22a)$$

$$(E_y)_j^{n+1} - (E_y)_j^n = (B_z)_j^{n+1} - (B_z)_j^n + \tau\omega_h^2 \frac{(p_{h,y})_j^{n+1} + (p_{h,y})_j^n + (p_{h,y})_j^{n+1} + (p_{h,y})_j^n}{4} + \tau\omega_e^2 \frac{(p_{e,y})_j^{n+\frac{1}{2}} + (p_{e,y})_j^{n+\frac{1}{2}}}{2} \quad (3.22b)$$

$$-\tau \frac{(E_y)_j^{n+1} + (E_y)_j^n}{2} = (1 + \tau\eta\omega_h^2)(p_{h,y})_j^{n+1} - (p_{h,y})_j^n \quad (3.22c)$$

$$-\tau(E_y)_j^n = (p_{e,y})_j^{n+\frac{1}{2}} - (p_{e,y})_j^{n-\frac{1}{2}}. \quad (3.22d)$$

Addition und Subtraktion von (3.22a) und (3.22b) liefert

$$\begin{aligned}
(E_y)_{j+1}^{n+1} + (E_y)_j^{n+1} - (E_y)_j^n - (E_y)_{j+1}^n &= (B_z)_j^{n+1} + (B_z)_j^n - (B_z)_{j+1}^{n+1} - (B_z)_{j+1}^n \\
&\quad + \tau\omega_h^2 \frac{(p_{h,y})_j^{n+1} + (p_{h,y})_j^n + (p_{h,y})_{j+1}^{n+1} + (p_{h,y})_{j+1}^n}{2} \\
&\quad + \tau\omega_e^2 \left((p_{e,y})_j^{n+\frac{1}{2}} + (p_{e,y})_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} \right) \\
(E_y)_{j+1}^{n+1} + (E_y)_{j+1}^n - (E_y)_j^{n+1} - (E_y)_j^n &= \\
&\quad - (B_z)_j^{n+1} + (B_z)_j^n - (B_z)_{j+1}^{n+1} + (B_z)_{j+1}^n.
\end{aligned}$$

Wieder setzen wir ebene Wellen ein und erhalten

$$\begin{aligned}
E_0(e^{i\frac{\omega\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}})(e^{i\frac{k\tau}{2}} + e^{-i\frac{k\tau}{2}}) &= B_0(e^{i\frac{\omega\tau}{2}} + e^{-i\frac{\omega\tau}{2}})(e^{-i\frac{k\tau}{2}} - e^{i\frac{k\tau}{2}}) \\
&\quad + (p_h)_0 \frac{\tau\omega_h^2}{2} (e^{i\frac{\omega\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}})(e^{i\frac{k\tau}{2}} + e^{-i\frac{k\tau}{2}}) \\
&\quad + (p_e)_0 \tau\omega_e^2 (e^{i\frac{k\tau}{2}} + e^{-i\frac{k\tau}{2}}) \\
E_0(e^{i\frac{\omega\tau}{2}} + e^{-i\frac{\omega\tau}{2}})(e^{i\frac{k\tau}{2}} - e^{-i\frac{k\tau}{2}}) &= B_0(e^{i\frac{\omega\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}})(e^{i\frac{k\tau}{2}} + e^{-i\frac{k\tau}{2}}) \\
\frac{-\tau E_0}{2} (e^{i\frac{\omega\tau}{2}} + e^{-i\frac{\omega\tau}{2}}) e^{-i\frac{k\tau}{2}} &= (1 + \tau\eta\omega_h^2) (p_h)_0 e^{i\frac{\omega\tau}{2}} e^{-i\frac{k\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}} e^{-i\frac{k\tau}{2}} (p_h)_0 \\
-\tau E_0 &= (p_e)_0 (e^{i\frac{\omega\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}}),
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
iE_0 \sin \frac{\omega\tau}{2} \cos \frac{k\tau}{2} &= -iB_0 \cos \frac{\omega\tau}{2} \sin \frac{k\tau}{2} + (p_h)_0 \frac{\tau\omega_h^2}{2} \cos \frac{\omega\tau}{2} \cos \frac{k\tau}{2} \\
&\quad + \frac{\tau\omega_e^2}{2} \cos \frac{k\tau}{2} (p_e)_0
\end{aligned} \tag{3.23a}$$

$$iE_0 \sin \frac{k\tau}{2} \cos \frac{\omega\tau}{2} = -iB_0 \sin \frac{\omega\tau}{2} \cos \frac{k\tau}{2} \tag{3.23b}$$

$$-\tau E_0 \cos \frac{\omega\tau}{2} = (p_h)_0 \left(2i \sin \frac{\omega\tau}{2} + \tau\eta\omega_h^2 e^{i\frac{\omega\tau}{2}} \right) \tag{3.23c}$$

$$2i(p_e)_0 \sin \frac{\omega\tau}{2} = -\tau E_0. \tag{3.23d}$$

Löst man (3.23b) nach B_0 , (3.23c) nach $(p_h)_0$, (3.23d) nach $(p_e)_0$ und setzt in (3.23a) ein, ergibt sich

$$\begin{aligned}
\sin^2 \frac{\omega\tau}{2} \cos^2 \frac{k\tau}{2} &= \cos^2 \frac{\omega\tau}{2} \sin^2 \frac{k\tau}{2} \\
&\quad + \left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \frac{\cos^2 \frac{\omega\tau}{2} \cos^2 \frac{k\tau}{2} \sin \frac{\omega\tau}{2}}{\sin \frac{\omega\tau}{2} - i\frac{\tau\eta\omega_h^2}{2} e^{i\frac{\omega\tau}{2}}} + \left(\frac{\tau\omega_e}{2} \right)^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2},
\end{aligned}$$

woraus wir

$$\cos^2 \frac{\omega\tau}{2} \left(1 + \left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \frac{\cos^2 \frac{k\tau}{2} \sin \frac{\omega\tau}{2}}{\sin \frac{\omega\tau}{2} - i \frac{\tau\eta\omega_h^2}{2} e^{i \frac{\omega\tau}{2}}} \right) = \cos^2 \frac{k\tau}{2} \left(1 - \left(\frac{\tau\omega_e}{2} \right)^2 \right) \quad (3.24)$$

erhalten. Für $\cos^2 \frac{k\tau}{2} = 1$, ist die Dispersionsrelation identisch zu der für die x -Komponente.

Im Fall $\eta = 0$ lautet die Dispersionsrelation

$$\cos^2 \frac{\omega\tau}{2} = \frac{\cos^2 \frac{k\tau}{2} (1 - (\frac{\tau\omega_e}{2})^2)}{1 + (\frac{\tau\omega_h}{2})^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2}} =: \xi^2 \quad (3.25)$$

und wir erhalten

$$\omega = \frac{2}{\tau} \arccos \xi.$$

Dies zeigt die uneingeschränkte Stabilität des Schemas für $\tau \leq 2/\omega_e$.

Für $\eta \neq 0$ betrachten wir die Dispersionsrelation wieder als Polynom in der Variablen $\epsilon = e^{i\omega\tau}$. Mit $\cos^2 \frac{\omega\tau}{2} = \frac{1}{4}(\epsilon + \frac{1}{\epsilon} + 2)$ und $\sin \frac{\omega\tau}{2} = \frac{1}{2i}(\sqrt{\epsilon} + \frac{1}{\sqrt{\epsilon}})$ ergibt sich aus (3.24)

$$\begin{aligned} & \left(\epsilon + \frac{1}{\epsilon} + 2 \right) \left(1 + \left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \frac{\epsilon - 1}{(1 + \tau\eta\omega_h^2)\epsilon - 1} \right) \\ & = 4 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \left(1 - \left(\frac{\tau\omega_e}{2} \right)^2 \right) \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} & \left((1 + \tau\eta\omega_h^2) + \left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \right) \epsilon^3 + \left(\left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2} - 1 \right. \\ & \quad \left. - (1 + \tau\eta\omega_h^2) 4 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \left(1 - \left(\frac{\tau\omega_e}{2} \right)^2 \right) + 2(1 + \tau\eta\omega_h^2) \right) \epsilon^2 \\ & \quad + \left((1 + \tau\eta\omega_h^2) - 2 + 4 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \left(1 - \left(\frac{\tau\omega_e}{2} \right)^2 \right) - \left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \right) \epsilon \\ & \quad - \left(1 + \left(\frac{\tau\omega_h}{2} \right)^2 \cos^2 \frac{k\tau}{2} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Auch hier haben wir die Relation numerisch gelöst und für $\tau \in (0, 2/\omega_e)$ und $\cos^2 \frac{k\tau}{2} \in [0, 1]$ liegen alle Nullstellen im Einheitskreis. Daher ist das Schema für die angegebenen Parameter stabil.

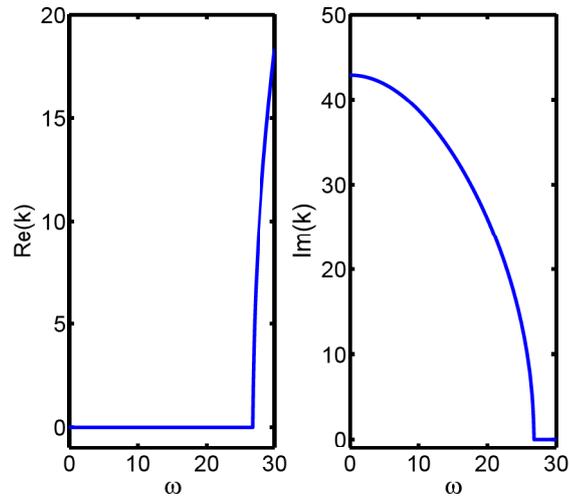


Abbildung 3.3: Plot des Real- und Imaginärteils der Kreiswellenzahl $k(\omega)$ der numerischen Dispersionsrelation (3.24) mit $\eta = 0$, $\omega_e = 0$, $\omega_h = 31.6$, $\tau = 0.05$ und $\omega \in [0, \frac{\pi}{2\tau}]$. Ein Simulationsbeispiel mit denselben Werten wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

Lösen wir (3.25) nach der Kreiswellenzahl auf ergibt sich

$$k = \frac{2}{\tau} \arccos \sqrt{\frac{\cos^2 \frac{\omega\tau}{2}}{1 - (\frac{\tau\omega_h}{2})^2 - (\frac{\tau\omega_e}{2})^2 \cos^2 \frac{\omega\tau}{2}}}.$$

Abbildung 3.3 zeigt einen Plot des Real- und Imaginärteils der Kreiswellenzahl $k(\omega)$ für $\eta = 0$, $\omega_e = 0$, $\omega_h = 31.6$, $\tau = 0.05$ und $\omega \in [0, \frac{\pi}{2\tau}]$.

Auf analoge Weise erhält man dieselbe Dispersionsrelation für die z -Komponente.

3.3 Physikalische Anwendungen

Das im vorigen Abschnitt beschriebene numerische Schema wurde sowohl in Matlab als auch in dem C++ Code H-VLPL implementiert. In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse des C++ Codes aus [26] vorgestellt. Der Code wurde an einigen für Anwendungen wichtigen Testbeispielen auf Genauigkeit und Anwendungsmöglichkeit getestet.

3.3.1 Reflexion und Brechung des Laserpulses

Als erstes testen wir ob Reflexion und Brechung eines Laserpulses, der auf eine dünne Plasmaschicht trifft, korrekt simuliert werden. Hierzu wählen wir einmal eine Plasmaschicht mit einer Dichte unter der kritischen Dichte ρ_c und einmal über der kritischen Dichte.

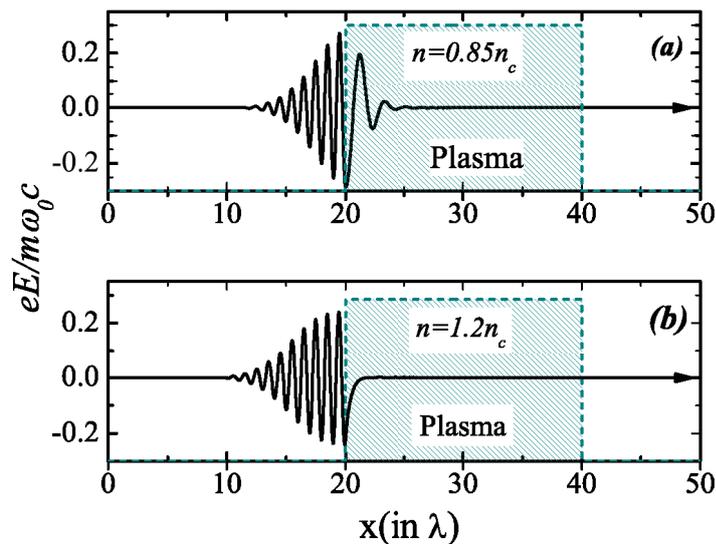


Abbildung 3.4: (a) Brechung des Laserpulses durch ein Plasma mit Dichte unter der kritischen Dichte ($\rho = 0.85\rho_c$). (b) Reflexion des Laserpulses durch ein Plasma mit Dichte über der kritischen Dichte ($\rho = 1.2\rho_c$). Der Ort ist mit der Wellenlänge λ skaliert.

In Abbildung 3.4(a) ist ein 30fs Gauß'scher Laserpuls mit Wellenlänge $\lambda = 0.82\mu\text{m}$ dargestellt, der auf eine Plasmaschicht mit $\rho = 0.85\rho_c$ trifft. Wie zu

erwarten dringt ein Teil des Laserpulses in das Plasma ein und ein Teil wird reflektiert. In Abbildung 3.4(b) ist der gleiche Laserpuls dargestellt, trifft aber auf ein Plasma mit Dichte $\rho = 1.2\rho_c$. In diesem Fall wird der Laserpuls erwartungsgemäß vollständig reflektiert. In beiden Beispielen wurden alle Teilchen hydrodynamisch behandelt, was zeigt, dass das hybride Schema in diesen Anwendungen, auch ohne kinetisch behandelte Teilchen mit einzubeziehen, das korrekte Ergebnis liefert.

3.3.2 Energieerhaltung

Ein physikalisch wichtiger Aspekt ist die Energieerhaltung in einem abgeschlossenen System. Wieder schicken wir einen Laserpuls auf eine Plasmaschicht, die diesmal sowohl hydrodynamisch als auch kinetisch behandelt wird. Die analytische Gleichung für die Energie des gesamten Systems setzt sich aus der elektromagnetischen Energie E_{EM} und der Energie der Teilchen E_{part} zusammen und ist durch

$$E_{tot} = E_{part} + E_{EM} = \sum_{\ell=e,i,h} m_{\ell}c^2(\gamma_{\ell} - 1) + \frac{1}{8\pi} \int_V (E^2 + B^2)dV \quad (3.27)$$

gegeben, wobei m_{ℓ} für die Massen der unterschiedlichen Teilchen steht und $\gamma = \sqrt{1 + (p/m_{\ell}c)^2}$ für den relativistischen Gamma-Faktor. Die Energie der Teilchen und das Integral über die Felder werden durch die Summe der Werte auf den Gitterzellen approximiert. Abbildung 3.5 zeigt die Gesamtenergie des Laser-Plasma-Systems, in welchem ein Laserpuls zwischen zwei Plasmaschichten reflektiert wird, gegen die in Wellenlängen gemessene Zeit. Die Gesamtenergie E_{tot} bleibt über eine sehr lange Simulationszeit nahezu konstant, wie in der kleinen Abbildung in Abbildung 3.5 zu sehen ist, sind die Abweichungen in der Größenordnung der Maschinengenauigkeit. Eine Simulation mit gleichen Parametern und ausschließlich kinetisch behandelten Teilchen zeigt Schwankungen der Energie in der gleichen Größenordnung.

3.3.3 Ionenbeschleunigung (TNSA)

Als nächstes Beispiel betrachten wir den Prozess der sogenannten target normal sheath acceleration (TNSA), welcher erstmals von Wilks et al. [45, 31] beschrieben wurde. Abbildung 3.6 zeigt das physikalische Modell zur Erzeugung von ultra-intensiven energiegeladenen Protonen. Wir simulieren einen 10fs langen Gauß'schen Puls, der sich in x -Richtung ausbreitet und auf eine $3.3 \mu m$ dünne Plasmaschicht, bestehend aus Elektronen, Ionen (Protonen mit

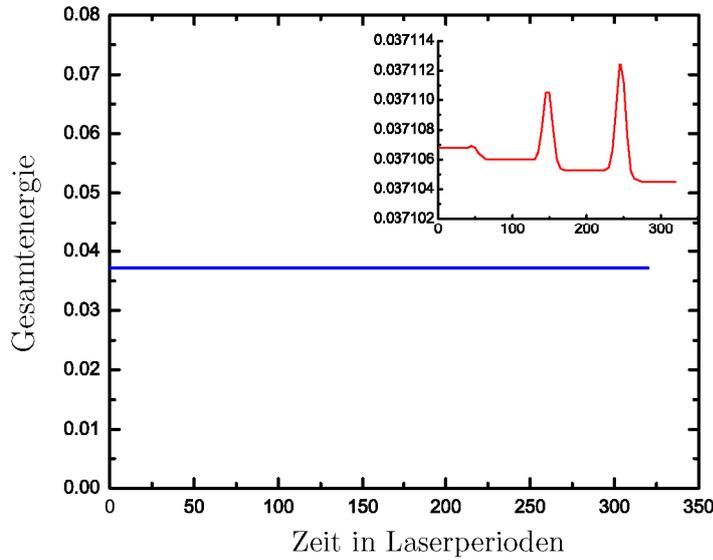


Abbildung 3.5: Erhaltung der Gesamtenergie des H-VLPL Codes. Plot der Gesamtenergie des Laser-Plasma-Systems gegen die in Wellenlängen gemessene Zeit. Die kleine Grafik zeigt eine um 10^{-6} genauere Skala.

$m_i/m_e = 1836$) und hydrodynamisch behandelten Teilchen, trifft. Die Dichte des Ziels wächst über eine Rampe mit $\sim 2\mu\text{m}$ bis auf $2\rho_c$, was zur Modellierung eines Vorplasmas dient [45], welches in realen Experimenten auftritt. Auf der Rückseite befindet sich eine dünne Protonenschicht, wo die Dichte wieder über eine Rampe auf 0 gesenkt wird. Der hochdichte Teil des Ziels wird mit hydrodynamisch behandelten Teilchen modelliert, wobei $\rho_h = 1000\rho_c$ gewählt ist. Die Amplitude des Laserpulses ist hier $a_0 = 2.0$, was einer Intensität von $5.5 \times 10^{18} \text{ Wcm}^{-2}$ entspricht.

Der extrem kurze Laserpuls erzeugt eine große Wolke heißer Elektronen, welche sich durch unser Objekt ausbreitet und die dünne Protonenschicht auf der Rückseite ionisiert. Die Protonen lösen sich durch das elektrostatische Feld der heißen Elektronen von der Oberfläche und werden eventuell auf sehr hohe Energien beschleunigt. In Abbildung 3.7 ist das Energiespektrum der beschleunigten Ionen dargestellt. Betrachtet man die Intensität des Lasers ist die maximal erreichte Energie von $\sim 1 \text{ MeV}$ bemerkenswert.

Um den hybriden Code mit dem konventionellen PIC-Code zu vergleichen, haben wir die gleiche Simulation mit ausschließlich kinetisch behandelten Teilchen durchgeführt. In Abbildung 3.7 sieht man ein sehr ähnliches Energiespek-

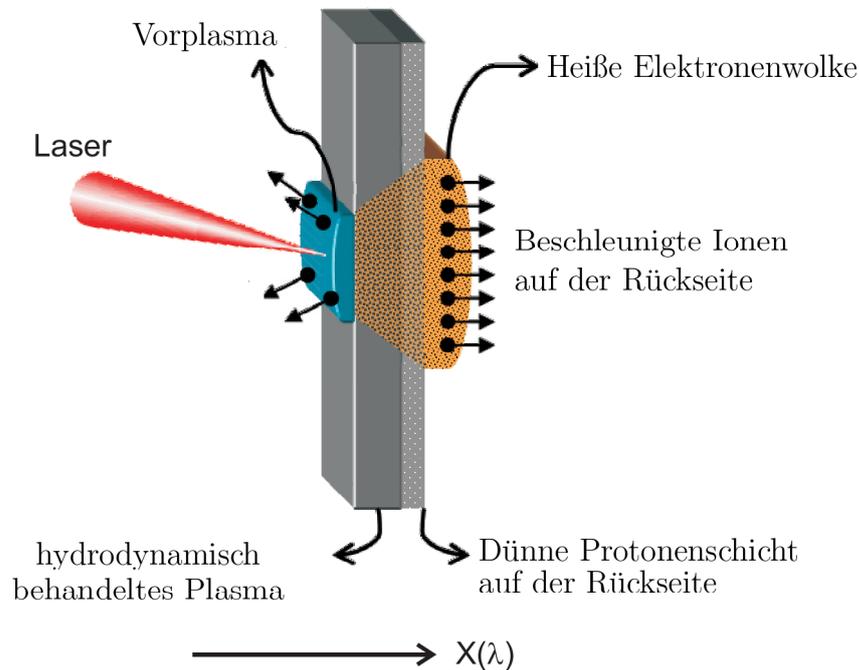


Abbildung 3.6: Physikalisches Modell der Ionenbeschleunigung bei der Wechselwirkung eines kurzen und ultra-intensiven Laserpulses mit einem dünnen Zielobjekt. (TNSA)

trum. Dies zeigt, dass sich der hybride Code für die Betrachtung von Systemen mit sehr hohen Dichten, wie z.B. die Erzeugung von monoenergetischen Ionenstrahlen [24], eignet bzw. man bei stark verkürzter Rechenzeit zu gleichen Ergebnissen wie denen des PIC-Code gelangt.

In Abbildung 3.8 ist ein Phasendiagramm einer heißen Elektronenwolke dargestellt. Das Phasendiagramm zur Zeit $T = \omega_0 t / 2\pi = 100$ zeigt, dass die Wolke heißer Elektronen im Zielobjekt zirkuliert und die Ionen anzieht und aufheizt. Mit dem Code H-VLPL ist es möglich für einen solchen Test bis zu 200 Teilchen pro Gitterzelle zu verwenden. Einige Ionen werden auch von der Vorderseite des Zielobjektes angezogen, diese sind aber wesentlich kälter verglichen zu denen auf der Rückseite des Zielobjektes. Der Großteil der Beschleunigung findet auf einer sehr kurzen Distanz von $\sim 4\mu m$ statt, was sehr gut zu bisherigen realen und simulierten Ergebnissen passt [45, 14].

Abschließend lässt sich sagen, dass der neue hybride Code H-VLPL sich als sehr geeignet zur Simulation der Erzeugung von energiereichen Ionen erweist.

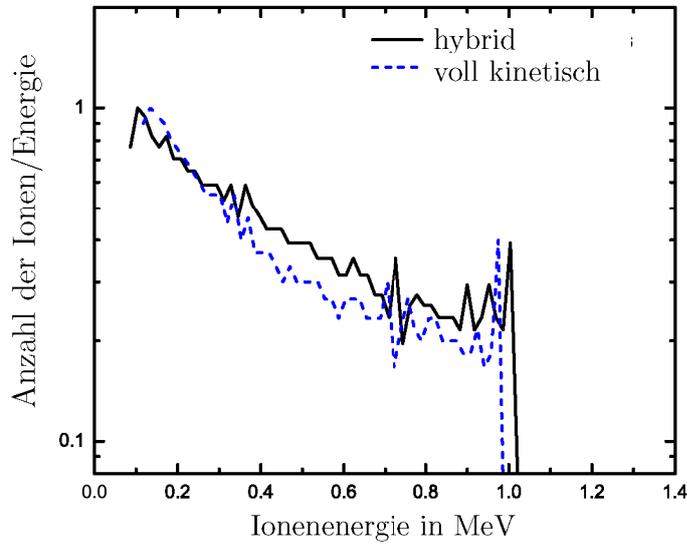


Abbildung 3.7: Energiespektrum der beschleunigten Ionen auf der Hinterseite des in Abbildung 3.6 dargestellten Zielobjektes zur Zeit $T = \omega_0 t / 2\pi = 150$. Die kinetische Energie der Ionen ist in MeV angegeben. Die gestrichelte Linie zeigt die Energie derselben Simulation, wobei alle Teilchen voll kinetisch behandelt wurden.

3.3.4 Dämpfung in hochdichten Plasmen

In diesem Abschnitt überprüfen wir, ob die Dämpfung eines auf ein hochdichtes Plasma treffenden Laserpulses korrekt simuliert wird. Bezeichnen wir mit E_s die Amplitude des Laserpulses an der Skintiefe $\delta_s = c/\omega_p$ und mit E_i die Amplitude des Laserpulses im Vakuum, so gilt

$$E_s^2/E_i^2 = \frac{4\rho_c}{\rho_e} \quad (3.28)$$

[19, Kapitel 5]. Wir wählen den Laserpuls als zirkular polarisierten Gaußpuls mit dimensionsloser Amplitude $a_0 = 0.2$ und einer Dauer von 10fs und testen das Verhalten für $\rho = 10, 100$ und $1000\rho_c$.

Abbildung 3.10 zeigt den quadrierten Quotienten E_s^2/E_i^2 als Funktion der normalisierten Plasmadichte $\rho = \rho_e/\rho_c$. Die numerischen Ergebnisse approximieren das analytische Resultat (3.28) sehr gut.

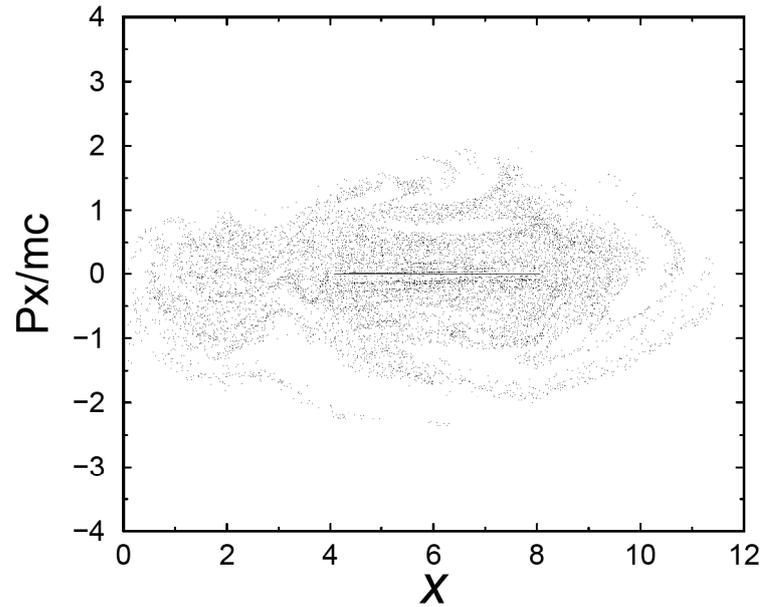


Abbildung 3.8: Phasenraumdiagramm der heißen Elektronenwolke zur Zeit $T = \omega_0 t / 2\pi = 100$. Plot der Impulse der Elektronen über den Ort.

Die elektromagnetische Feldintensität

$$I = \frac{|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2}{2}$$

fällt analytisch wie

$$\ln I = -\frac{2x}{\delta_s} \quad (3.29)$$

[19, Kapitel 5]. Abbildung 3.11 zeigt den Vergleich der analytischen Lösung und wie die Felder in der Simulation gedämpft werden. Sogar bei sehr hohen Dichten erhält man sehr gute Approximationen. Für $\rho_e = 1000\rho_c$ liegt die Skinlänge bei $\delta_s/\lambda = 0.005$. Die Simulation liefert mit $h_x/\lambda = 0.05$, d.h. auch wenn die Gitterweite viel größer als die Skinlänge ist, sehr gute Ergebnisse.

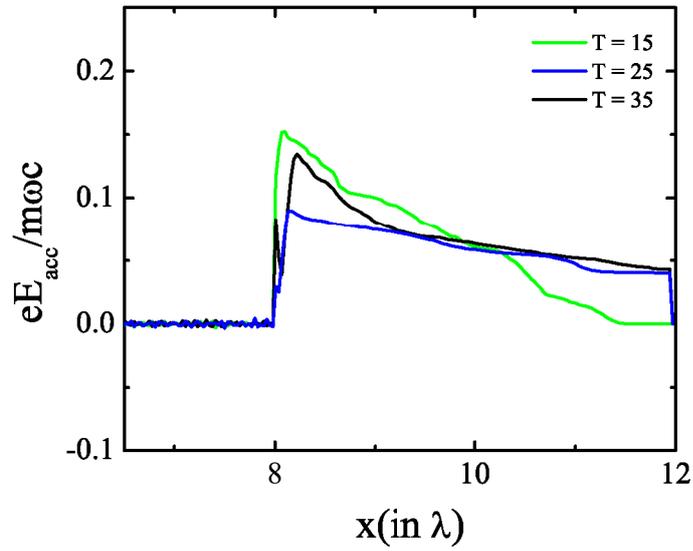


Abbildung 3.9: Das elektrische Feld zu den Zeiten $T = \omega_0 t / 2\pi = 15, 25$ und 35 .

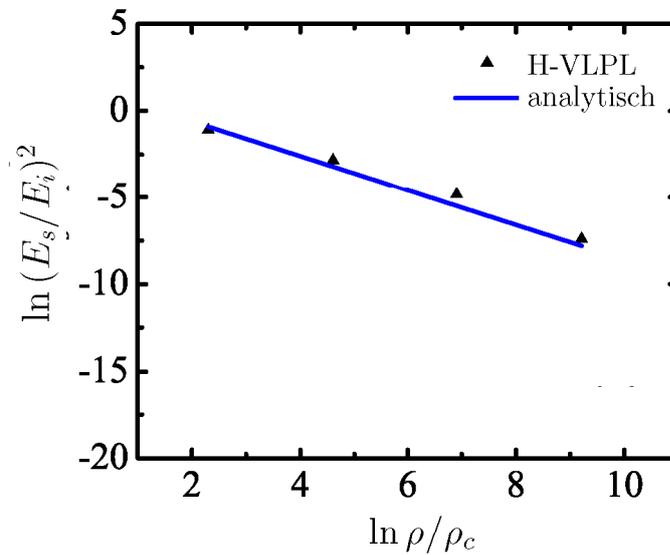


Abbildung 3.10: Logarithmischer Plot von (3.28) für vier verschiedene hybride Dichten. Die blaue durchgezogene Linie zeigt die analytische Lösung.

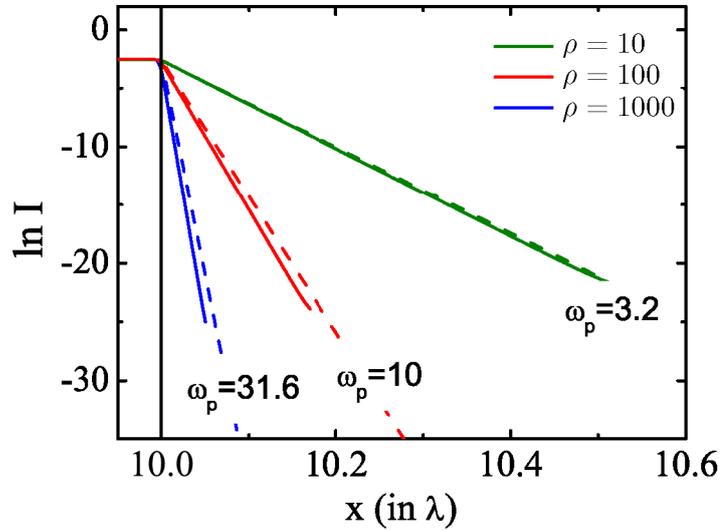


Abbildung 3.11: Logarithmischer Plot von (3.29) für drei verschiedene hybride Dichten. Die gestrichelten Linien zeigen jeweils die analytische Lösung.

3.3.5 Kollisionen von Teilchen

Da bei extrem hochdichten und warmen Plasmen auch die Kollisionen von Elektronen und Ionen, welche man sonst vernachlässigen kann, eine wichtige Rolle spielen sind die dadurch auftretenden Effekte in den Code eingebaut. Um dies zu testen, schießen wir einen Laserpuls auf ein unterdichtetes Plasma, $\rho = 0.04\rho_c$ und vergleichen mit der analytischen Lösung [23, Kapitel 5]:

$$\ln(E/E_0) = \text{Re}[-i\omega t + ikx - \Theta x], \quad (3.30)$$

wobei

$$\Theta \approx \frac{1}{2} \frac{\omega_p^2(\nu_{ei}/\omega)}{(\omega^2 - \omega_p^2)^{1/2}}.$$

Abbildung 3.12 zeigt den Vergleich der numerischen Ergebnisse und der Theorie. Der Laserpuls wurde schwach relativistisch, $a_0 = 0.2$, und relativ lang, 50fs, um Dispersion zu vermeiden, gewählt. Die Kollisionsfrequenz η beträgt 0.5. Die Simulation zeigt, dass das \mathbf{E} -Feld wie erwartet, während es sich im Plasma ausbreitet, exponentiell abfällt. Abbildung 3.13 zeigt die mit der Zeit zunehmende Intensität. Auch dies passt sehr gut zur Theorie.

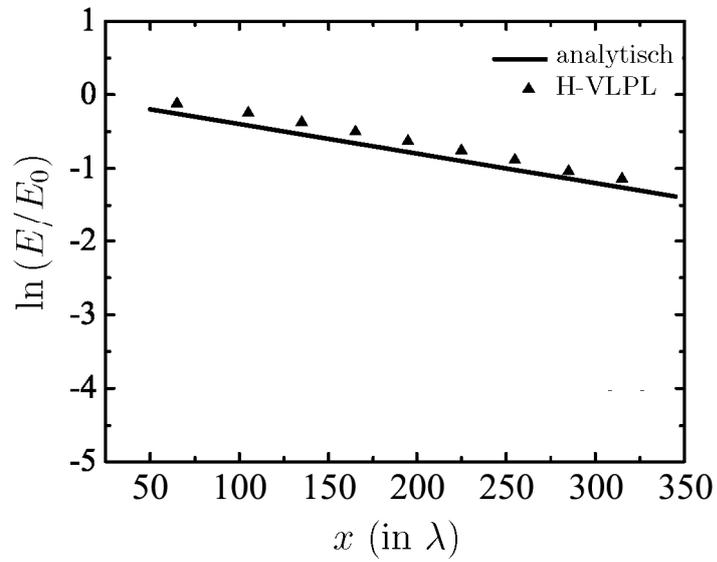


Abbildung 3.12: Logarithmischer Plot von (3.30) über die in Wellenlängen gemessene Ausbreitungsrichtung.

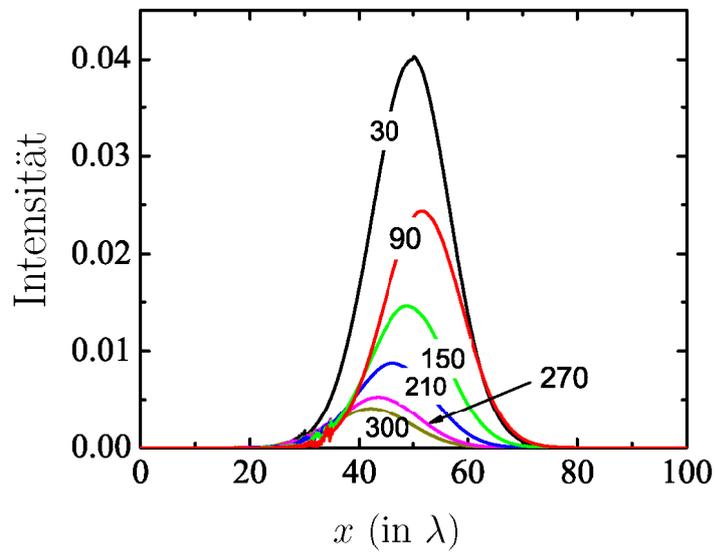


Abbildung 3.13: Dämpfung der Intensität bei fortschreitender Zeit.

3.4 Fazit

Die Vergleiche mit dem Code VLPL aus dem vorigen Abschnitt zeigen, dass sich der implizite 1D Code H-VLPL sehr gut eignet, um physikalische Anwendungen zu simulieren. Weiterhin lassen sich durch die hybride Modellierung Plasmen mit sehr hohen Dichten in einer akzeptablen Zeit simulieren, was mit VLPL nicht möglich ist.

Allerdings müssen bei diesem Ansatz Gleichungssysteme gelöst werden, siehe Abschnitt 3.1. Da die aus einer 3D Diskretisierung resultierenden Gleichungssysteme sehr groß werden und deren Lösung ineffizient ist, verwenden wir einen anderen Ansatz, um einen effizienten 3D Code zu entwickeln. Im nächsten Kapitel folgt zunächst ein Exkurs über numerische Verfahren für hoch oszillatorische Differentialgleichungen mit konstanten hohen Frequenzen und Splitting-Methoden, was die Grundlage der entwickelten 3D Version von H-VLPL bildet, welche im letzten Kapitel vorgestellt wird.

4 Exkurs: Numerische Verfahren für hoch oszillatorische Differentialgleichungen mit konstanten hohen Frequenzen und Splitting - Methoden

In diesem Abschnitt wird zum einen ein Einblick in numerische Verfahren zur Lösung von hoch oszillatorischen Differentialgleichungen mit konstanten hohen Frequenzen gegeben und zum anderen in Splitting-Methoden, welche oft bei der Lösung solcher Probleme eingesetzt werden.

4.1 Splitting-Methoden

Im Folgenden betrachten wir Splitting-Methoden zur Lösung eines allgemeinen Differentialgleichungssystems in autonomer Form

$$u' = f(u), \quad u \in \mathbb{R}^m. \quad (4.1)$$

Ein wichtiger Begriff hierbei ist der Fluss des Differentialgleichungssystems.

Definition: Der **Fluss** φ_t eines Differentialgleichungssystems (4.1) ist die Abbildung, die einen beliebigen Punkt u^0 auf die Lösung mit Anfangswert $u(0) = u^0$ zur Zeit t abbildet

$$\varphi_t : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad u^0 \mapsto u(t).$$

Dies ist der exakte Fluss und analog definiert man einen Schritt eines numerischen Verfahrens als numerischen Fluss. Die Abbildung die einen Startwert u^n zur Zeit t_n auf die Approximation u^{n+1} zur Zeit $t_{n+1} = t_n + \tau$ abbildet

$$\Phi_\tau : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad u^n \mapsto u^{n+1}.$$

Die Idee von Splitting-Methoden besteht darin bei einem beliebigen Differentialgleichungssystem (4.1) das Vektorfeld $f(u)$ aufzusplitten und das Differentialgleichungssystem in der Form

$$u' = f_1(u) + f_2(u) + \dots + f_N(u)$$

zu schreiben. Dann löst man die N Differentialgleichungen $u' = f_j(u)$ $j = 1, \dots, N$ einzeln. Dies lässt sich in manchen Fällen exakt tun, wie wir später

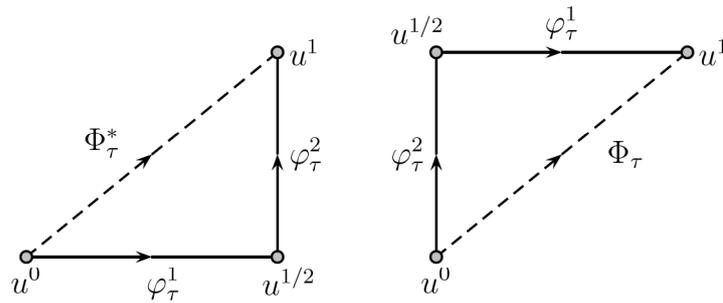


Abbildung 4.1: Lie-Trotter-Splitting

sehen werden. Um dies zu veranschaulichen betrachten wir den Fall $N = 2$. Wir betrachten also die beiden Differentialgleichungen

$$u' = f_1(u) \quad \text{und} \quad u' = f_2(u)$$

und nehmen an, dass wir beide exakt lösen können. Man startet von einem gegebenen Startwert u^0 und löst zunächst die eine Differentialgleichung, um einen Wert $u^{1/2}$ zu erhalten. Mit diesem Startwert löst man dann die andere und erhält u^1 . Dies kann man in beiden möglichen Reihenfolgen tun und erhält daraus die zwei numerischen Verfahren

$$\Phi_\tau = \varphi_\tau^2 \circ \varphi_\tau^1 \quad \text{und} \quad \Phi_\tau^* = \varphi_\tau^1 \circ \varphi_\tau^2,$$

wobei Φ_τ^* die adjungierte Abbildung zu Φ_τ bezeichnet. Abbildung 4.1 veranschaulicht dies.

Diese beiden Splittings werden häufig Lie-Trotter-Splitting [38] genannt und mittels Taylorentwicklung folgt $(\varphi_\tau^1 \circ \varphi_\tau^2) = \varphi_\tau(y_0) + O(\tau^2)$, d.h. diese beiden Approximationen haben Ordnung 1. Eine geschicktere Art die exakten Flüsse der beiden gesplitteten Gleichungen zu kombinieren, ist ein symmetrisches Splitting

$$\Phi_\tau^s = \varphi_{\tau/2}^1 \circ \varphi_\tau^2 \circ \varphi_{\tau/2}^1.$$

Man löst also die eine Gleichung mit halber Schrittweite, dann löst man die andere mit ganzer Schrittweite und anschließend wieder ein halber Schritt der ersten Gleichung, Abbildung 4.2.

Dieses Splitting wird auch Strang-Splitting [36] genannt und hat wegen der Symmetrie Ordnung 2.

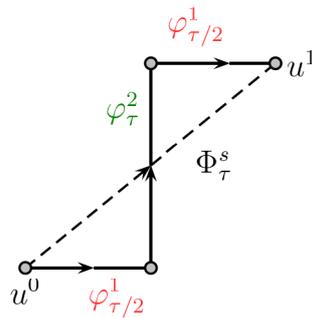


Abbildung 4.2: Strang-Splitting

Als Beispiel betrachten wir das Differentialgleichungssystem

$$\begin{bmatrix} p' \\ q' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(q) \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(q) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ p \end{bmatrix}. \quad (4.2)$$

Durch das Splitting erhalten wir die beiden Systeme

$$\begin{array}{ll} (1) & p' = f(q) \\ & q' = 0 \end{array} \quad \begin{array}{ll} (2) & p' = 0 \\ & q' = p, \end{array}$$

welche sich exakt lösen lassen

$$\begin{array}{ll} \varphi_{\tau}^1 : p(t + \tau) = p(t) + \tau f(q(t)), & \varphi_{\tau}^2 : p(t + \tau) = p(t) \\ & q(t + \tau) = q(t) \end{array} \quad \begin{array}{ll} & q(t + \tau) = q(t) + \tau p(t). \end{array}$$

Wendet man das Strang-Splitting an so ergibt sich das Störmer-Verlet-Verfahren [35, 42], welches am Anfang des nächsten Abschnitts genauer erläutert wird

$$\begin{array}{l} p^{n+\frac{1}{2}} = p^n + \frac{\tau}{2} f(q^n) \\ q^{n+1} = q^n + \tau p^{n+\frac{1}{2}}, \\ p^{n+1} = p^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{2} f(q^{n+1}). \end{array} \quad (4.3)$$

4.2 Oszillatorische Differentialgleichungen mit konstanten hohen Frequenzen

Als nächstes gehen wir auf numerische Verfahren zur Lösung hoch oszillatorischer Differentialgleichungen ein. Hierbei betrachten wir zunächst Systeme zweiter Ordnung, welche sich auf Systeme erster Ordnung zurückführen lassen. Wir betrachten das Differentialgleichungssystem der Form

$$q'' = f(q) = -\nabla V(q)$$

mit einem Potential $V(q)$. Durch Hinzufügen der Gleichung $p = q'$ und mit $f(q) = -\nabla V(q)$ ist dieses System äquivalent zu (4.2). Der Standard-Integrator für Differentialgleichungen dieser Art ist das Störmer-Verlet-Verfahren, welches man erhält, wenn man die zweite Ableitung durch den zentralen Differenzenquotienten zweiter Ordnung ersetzt. Es ist das z.B. in der Moleküldynamik oder Astrophysik wohl meist benutzte Verfahren, um die Newton'schen Bewegungsgleichungen von Teilchensystemen zu lösen. Die Zweischritt-Formulierung, mit $q^n \approx q(t_n)$ und $f^n = -\nabla V(q^n)$, lautet

$$q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1} = \tau^2 f^n.$$

Setzt man $p = q'$ erhält man Approximationen an die Ableitung zur Zeit t_n und $t_{n+\frac{1}{2}}$ durch

$$p^n = \frac{q^{n+1} - q^{n-1}}{2\tau} \quad \text{und} \quad p^{n+\frac{1}{2}} = \frac{q^{n+1} - q^n}{\tau}.$$

So erhält man die explizite Einzschritt-Formulierung aus dem vorigen Abschnitt

$$\begin{aligned} p^{n+\frac{1}{2}} &= p^n + \frac{\tau}{2} f^n \\ q^{n+1} &= q^n + \tau p^{n+\frac{1}{2}} \\ p^{n+1} &= p^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{2} f^{n+1}. \end{aligned}$$

Wie im vorigen Abschnitt gesehen, kann das Verfahren als Strang-Splitting aufgefasst werden, woran man sieht, dass es symmetrisch ist und daher klassische Ordnung 2 hat. Das Verfahren ist stabil, falls

$$\tau\omega < 2$$

gilt [13, Kapitel 13, 1.1], wobei ω die größte Eigenfrequenz bzw. die Wurzel des größten Eigenwertes von $\nabla^2 V(q)$ ist. Um dies einzusehen, betrachten wir die zwei Differentialgleichungen

$$p' = -\omega^2 q, \quad q' = p.$$

Das Störmer-Verlet-Schema darauf angewandt, lässt sich in der Form

$$\begin{bmatrix} p^{n+1} \\ \omega q^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\tau^2 \omega^2}{2} & -\tau \omega \left(1 - \frac{\tau^2 \omega^2}{4}\right) \\ \tau \omega & 1 - \frac{\tau^2 \omega^2}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p^n \\ \omega q^n \end{bmatrix}$$

schreiben und das charakteristische Polynom der Matrix ist durch $\lambda^2 - (2 - \tau^2 \omega^2)\lambda + 1$ gegeben. Der Betrag der Eigenwerte ist also genau dann kleiner als eins, wenn $|\tau \omega| \leq 2$ gilt.

In vielen Anwendungen ist $V(q)$ die Summe von Potentialen, welche auf unterschiedlichen Zeitskalen leben, worauf wir im Folgenden genauer eingehen und es auch später ausnutzen werden. Wir schreiben

$$V(q) = W(q) + U(q), \quad (4.4)$$

wobei $-\nabla W(q)$ die schnelle Kraft und $-\nabla U(q)$ die langsame bezeichnet. Zusätzlich soll

$$\nabla^2 W(q) \text{ positiv semidefinit sein und } \|\nabla^2 W(q)\| \gg \|\nabla^2 U(q)\| \quad (4.5)$$

gelten.

Die erste Methode, die große Zeitschritte bei der Behandlung solcher oszillatorischen Probleme erlaubte, stammt von W. Gautschi [8]. Für den häufig auftretenden Spezialfall eines quadratischen Potentials $W(q) = \frac{1}{2}\omega^2 q^T q$ mit $\omega \gg 1$ und $U(q) = g(q)$, konstruierte Gautschi mehrere Verfahren, welche die exakte Lösung liefern, falls die Lösung ein trigonometrisches Polynom in ωt ist. Wir betrachten hier nicht den skalaren Fall, sondern das Potential $W(q) = \frac{1}{2}q^T \Omega^2 q$ mit einer symmetrisch positiv semidefiniten Matrix Ω und $\|\Omega\| \gg 1$. Die Gleichung hat dann die Form

$$q'' = -\Omega^2 q + g(q). \quad (4.6)$$

Das einzige symmetrische und bekannteste Verfahren lautet

$$q^{n+1} - 2 \cos \Omega \tau q^n + q^{n-1} = \tau^2 \operatorname{sinc}^2 \frac{\Omega \tau}{2} g^n$$

und löst (4.6) exakt für konstantes g [13, Kapitel 13, 1.2], wobei $g^n = g(q^n)$ sowie $\operatorname{sinc} x = \frac{\sin x}{x}$. Dies folgt sofort aus der Variation-der-Konstanten-Formel

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} q(t) \\ q'(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \Omega t & \omega^{-1} \sin \Omega t \\ -\Omega \sin \Omega t & \cos \Omega t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(0) \\ q'(0) \end{bmatrix} \\ &+ \int_0^t \begin{bmatrix} \Omega^{-1} \sin \Omega(t-s) \\ \cos \Omega(t-s) \end{bmatrix} g(q(s)) ds. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Auf der Grundlage dessen betrachten wir jetzt eine Methode, die speziell für den Fall, dass das Potential aus (4.4) die Voraussetzung (4.5) erfüllt, konstruiert wurde. Die sogenannte *Impulsmethode*, welche sowohl von Grubmüller, Heller, Windemuth und Schulden [11] als auch von Tuckerman, Berne und Martyna [39] vorgestellt wurde:

$$\begin{aligned} \text{kick: } p_+^n &= p^n - \frac{\tau}{2} \nabla U(q^n) \\ \text{oszilliere: } &\text{Löse } q'' = -\nabla W(q) \text{ mit Anfangswerten } (q^n, p_+^n) \\ &\text{und erhalte } (q^{n+1}, p_-^n) \\ \text{kick: } p_-^{n+1} &= p_-^n - \frac{\tau}{2} \nabla U(q^{n+1}). \end{aligned}$$

Im Allgemeinen muss die Lösung des Oszillations-Schritt mit einem numerischen Verfahren berechnet werden, aber im Fall eines quadratischen Potentials $W(q) = \frac{1}{2}q^T \Omega^2 q$ lässt sich die Lösung exakt angeben, was wir im nächsten Kapitel ausnutzen werden.

Biesadecki und Skeel [1] und Garcia-Archilla, Sanz-Serna und Skeel [7] haben für dieses Verfahren Instabilitäten festgestellt, falls das Produkt der Zeitschrittweite τ und einer Eigenfrequenz ω von $\nabla^2 W$ ein Vielfaches von π ist. Dieses Problem wurde in [7] behandelt und es entstand die sogenannte *geglättete Impulsmethode*.

Die Grundidee ist die langsame Kraft $-\nabla U(q)$ an gemittelten Werten \bar{q}^n auszuwerten. Denn die Kraft an einem bestimmten Punkt der hoch oszillatorischen Lösung auszuwerten, kann je nachdem wo auf der Lösung der Punkt liegt zu sehr unterschiedlichen Werten führen. Daher wählen sie einen Mittelwert über den Zeitschritt.

Sei $a : \mathbb{R}^\nu \rightarrow \mathbb{R}^\nu$ eine geeignete Mittelungsfunktion. Setzen wir $\bar{q}^n = a(q)$ und ersetzen das Potential $U(q)$ durch $\bar{U}(q) = U(a(q))$ erhalten wir die *geglättete Kraft*

$$-\nabla \bar{U}(q) = -a'(q)^T \nabla U(a(q)).$$

Die Frage ist wie man diesen Mittelwert wählt. In [7] wird der Mittelwert der Lösung im Oszillations-Schritt gewählt und das Hilfsproblem

$$x'' = -\nabla W(x), \quad x(0) = q, \quad x'(0) = 0$$

gelöst, sowie das zugehörige Variationsproblem

$$X'' = -\nabla^2 W(x)X, \quad X(0) = I, \quad X'(0) = 0$$

[13, Kapitel 13]. Anschließend mittelt man über das Zeitintervall der Länge τ

$$a(q) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau x(t) dt, \quad a'(q) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau X(t) dt.$$

Im Spezialfall eines quadratischen Potentials $W(q) = \frac{1}{2} q^T \Omega^2 q$ mit einer symmetrischen positiv semidefiniten Matrix Ω^2 lässt sich der Mittelwert analytisch berechnen.

Die Lösung von

$$x'' = -\nabla W(x) = -\Omega^2 x, \quad x(0) = q, \quad x'(0) = 0.$$

ist durch $x(t) = \cos(\Omega t)q$ gegeben. Damit ergibt sich

$$a(q) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau x(t) dt = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \cos(\Omega t) q dt = \frac{1}{\tau} \Omega^{-1} \sin \Omega \tau = \phi(\tau \Omega) q,$$

mit $\phi(x) = \text{sinc } x$ und damit dann $a'(q) = \phi(\tau \Omega)$. Es ergibt sich die geglättete Impulsmethode

$$\begin{aligned} p_+^n &= p^n - \frac{\tau}{2} \phi(\tau \Omega) \nabla U(\phi(\tau \Omega) q^n), \\ \begin{bmatrix} q^{n+1} \\ p_-^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau \Omega & \tau \text{sinc } \tau \Omega \\ -\Omega \sin \tau \Omega & \cos \tau \Omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q^n \\ p_+^n \end{bmatrix} \\ p_-^{n+1} &= p_-^{n+1} - \frac{\tau}{2} \phi(\tau \Omega) \nabla U(\phi(\tau \Omega) q^{n+1}). \end{aligned}$$

Die Funktion ϕ wird im Allgemeinen als Filter-Funktion bezeichnet. Sowohl das Verfahren von Gautschi als auch die geglättete Impulsmethode zählen zu einer Klasse von Verfahren, welche als Gautschi-Typ Integratoren bezeichnet werden. In [16] werden Zwei-Schritt-Verfahren dieser Klasse von Hochbruck und Lubich analysiert und Zweite-Ordnung-Fehlerschranken angegeben. Insbesondere wird die Bedeutung der Filter-Funktionen aufgezeigt und es werden unterschiedliche Wahlen dieser diskutiert. In [10] geben Grimm und Hochbruck Bedingungen an, welche Zweite-Ordnung-Fehlerschranken, unabhängig von dem Produkt der Schrittweite und der Frequenz, für Ein-Schritt-Verfahren garantieren und eine Konvergenzanalyse, welche die Resultate über die geglättete Impulsmethode und Gautschi-Typ Integratoren verallgemeinern. Eine Übersicht über hoch oszillatorische Probleme und deren Fehleranalyse wurde dieses Jahr in einem Übersichtsartikel von Hochbruck und Ostermann veröffentlicht [17]. Im nächsten Kapitel werden wir sehen wie sich die Techniken und Ideen anwenden lassen, um das Laser-Plasma-Problem effizient zu lösen.

5 Ein neuer Ansatz zur hybriden Simulation von Laser-Plasma-Wechselwirkungen

In diesem Kapitel wird ein neuer Ansatz, motiviert durch die im vorigen Kapitel erläuterten Techniken und Ideen, zur Simulation der Laser-Plasma-Wechselwirkungen vorgestellt. Im ersten Abschnitt wird gezeigt, wie man Splitting-Methoden zur Zeitdiskretisierung auf das Problem anwenden kann. Anschließend wird die Ortsdiskretisierung in 1D, 2D und 3D behandelt. Im zweiten Abschnitt wird zunächst die Ortsdiskretisierung in 1D betrachtet, die Stabilität analysiert, gezeigt wie man ein Verfahren zweiter Ordnung erhält und es werden Simulationsergebnisse in Matlab vorgestellt. Im dritten Abschnitt werden die Resultate und das Matlab-Programm auf 2D erweitert. Anschließend wird das Hauptziel des Projektes B5 im Sonderforschungsbereich Transregio 18 vorgestellt, ein in C++ implementierter *3D Code zur Simulation der Wechselwirkung relativistischer Kurzpuls-Laser mit hochdichten Plasmen*. Im vorletzten Abschnitt wird die Dispersionsrelation in 1D hergeleitet und im letzten der 3D C++ Code an einigen physikalischen Anwendungen getestet.

Wir verwenden wie im ersten Teil der Arbeit zur Modellierung die Maxwellgleichungen kombiniert mit Gleichungen für die Impulse der Teilchen (2.3), wobei wir an dieser Stelle den Kollisionsparameter $\nu = 0$ setzen und wieder die dimensionslosen Gleichungen verwenden. Zunächst wird ein vereinfachter Fall betrachtet, in dem alle Teilchen hydrodynamisch behandelt werden. Anschließend wird das numerische Schema mit dem PIC-Code VLPL gekoppelt. Der 3D C++ Code H-VLPL bietet die Möglichkeit die Teilchen kinetisch und hydrodynamisch zu behandeln.

Die Gleichungen sind durch

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{B} + \omega_p^2 \mathbf{p} \quad (5.1a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (5.1b)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\mathbf{E}, \quad (5.1c)$$

gegeben, wobei $\omega_p^2 = \frac{\rho_h}{\gamma_h}$ und $\mathbf{p} := \mathbf{p}_h$.

5.1 Splitting – Zeitdiskretisierung

Wir schreiben die Gleichungen in einen Vektor und splitten die einzelnen Vektorfelder wie folgt

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{p}' \\ \mathbf{E}' \\ \mathbf{B}' \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -\mathbf{E} \\ \nabla \times \mathbf{B} + \omega_p^2 \mathbf{p} \\ -\nabla \times \mathbf{E} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\nabla \times \mathbf{E} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\mathbf{E} \\ \omega_p^2 \mathbf{p} \\ 0 \end{bmatrix} =: f_1 + f_2 + f_3, \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{E}' = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}$, $\mathbf{B}' = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}$ und $\mathbf{p}' = \frac{d}{dt} \mathbf{p}$ bezeichnet. So erhalten wir drei Differentialgleichungssysteme

$$\begin{bmatrix} \mathbf{p}' \\ \mathbf{E}' \\ \mathbf{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\nabla \times \mathbf{E} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \mathbf{p}' \\ \mathbf{E}' \\ \mathbf{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \nabla \times \mathbf{B} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \mathbf{p}' \\ \mathbf{E}' \\ \mathbf{B}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{E} \\ \omega_p^2 \mathbf{p} \\ 0 \end{bmatrix},$$

die wir einzeln exakt lösen können. Die Lösung der ersten beiden ist trivial. Einmal sind \mathbf{p} und \mathbf{E} konstant und \mathbf{B} linear. Beim zweiten sind \mathbf{p} und \mathbf{B} konstant und \mathbf{E} linear. Das dritte System schreiben wir als $\mathbf{E}'' = -\omega_p^2 \mathbf{E}$, wenden die Variation-der-Konstanten-Formel an und lösen die Gleichung exakt für festes ω_p . Anschließend approximieren wir den exakten Fluss φ_τ des Gesamtsystems durch die exakten Flüsse der einzelnen Systeme in symmetrischer Form

$$\varphi_\tau \approx \varphi_{\tau/2}^1 \circ \varphi_{\tau/2}^2 \circ \varphi_\tau^3 \circ \varphi_{\tau/2}^2 \circ \varphi_{\tau/2}^1.$$

Man könnte natürlich die ersten beiden Systeme zusammenfassen, also insgesamt nur in zwei Systeme splitten, aber besonders in drei Raumdimensionen spart diese Art von Splitting Rechenzeit, da man die exakte Lösung sofort angeben kann. Das obige Splitting sieht dann folgendermaßen aus

$$\text{kick:} \quad \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^n \quad (5.2a)$$

$$(\mathbf{E}^+)^n = \mathbf{E}^n + \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.2b)$$

$$\text{oszilliere:} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{p}^{n+1} \\ (\mathbf{E}^-)^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p^n & \tau \text{sinc } \tau \omega_p^n \\ -\omega_p \sin \tau \omega_p^n & \cos \tau \omega_p^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}^n \\ (\mathbf{E}^+)^n \end{bmatrix} \quad (5.2c)$$

$$\text{kick:} \quad \mathbf{E}^{n+1} = (\mathbf{E}^-)^{n+1} + \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}} \quad (5.2d)$$

$$\mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^{n+1}. \quad (5.2e)$$

Wir starten einen Zeitschritt mit $(\mathbf{p}^n, \mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n)$. Ausgehend davon integrieren wir die ersten beiden Differentialgleichungssysteme exakt und führen einen halben Zeitschritt durch. Dann lösen wir den oszillierenden Teil exakt mit den Startwerten $(\mathbf{p}^n, (\mathbf{E}^+)^n)$ und festem $\omega_p^n = \rho_h / \sqrt{1 + (p^n)^2}$. Also ist das Verfahren für $\gamma_h = 1$ symmetrisch.

Definition: Ein numerisches Verfahren $u^{n+1} = \Phi_\tau(u^n)$ ist symmetrisch, falls $\Phi_\tau \circ \Phi_{-\tau} = id$ gilt [13, Kapitel 5].

Um die Symmetrie eines Verfahrens zu zeigen, reicht es nach der Definition aus, dass man wieder am Startwert auskommt, wenn man einen Schritt des Verfahrens mit der Schrittweite τ macht und anschließend einen mit der Schrittweite $-\tau$, d.h. wenn man im Schema n mit $n+1$ und τ mit $-\tau$ vertauscht, erhält man wieder das Verfahren.

Satz 5.1: Das numerische Schema (5.2) ist für $\gamma_h = 1$ symmetrisch.

Beweis: Setzt man (5.2a) in (5.2e) ein, so erhält man

$$\mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times (\mathbf{E}^n + \mathbf{E}^{n+1}). \quad (5.3)$$

Ersetzt man nun $n \leftrightarrow n+1$ und $\tau \leftrightarrow -\tau$ sieht man sofort die Symmetrie in \mathbf{B} .

Um zu sehen, dass das Schema symmetrisch in \mathbf{E} und \mathbf{p} ist, setzen wir zunächst (5.2a) in (5.2b) und (5.2d) ein

$$\begin{aligned} (\mathbf{E}^+)^n &= \mathbf{E}^n + \frac{\tau}{2} \nabla \times \left(\mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^n \right) \\ \begin{bmatrix} \mathbf{p}^{n+1} \\ (\mathbf{E}^-)^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p \\ -\omega \sin \tau \omega_p & \cos \tau \omega_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}^n \\ (\mathbf{E}^+)^n \end{bmatrix} \\ \mathbf{E}^{n+1} &= (\mathbf{E}^-)^{n+1} + \frac{\tau}{2} \nabla \times \left(\mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^n \right). \end{aligned}$$

Anschließend ersetzen wir wieder $n \leftrightarrow n+1$ und $\tau \leftrightarrow -\tau$. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} (\mathbf{E}^+)^{n+1} &= \mathbf{E}^{n+1} - \frac{\tau}{2} \nabla \times \left(\mathbf{B}^{n+1} + \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^{n+1} \right) \\ \begin{bmatrix} \mathbf{p}^n \\ (\mathbf{E}^-)^n \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p & -\tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p \\ \omega \sin \tau \omega_p & \cos \tau \omega_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}^{n+1} \\ (\mathbf{E}^+)^{n+1} \end{bmatrix} \\ \mathbf{E}^n &= (\mathbf{E}^-)^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \left(\mathbf{B}^{n+1} + \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Setzt man nun (5.3) ein und multipliziert mit der inversen Matrix folgt

$$\begin{aligned} (\mathbf{E}^+)^{n+1} &= \mathbf{E}^{n+1} - \frac{\tau}{2} \nabla \times \left(\mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^n \right) \\ \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p \\ -\omega \sin \tau \omega_p & \cos \tau \omega_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}^n \\ (\mathbf{E}^-)^n \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{p}^{n+1} \\ (\mathbf{E}^+)^{n+1} \end{bmatrix} \\ \mathbf{E}^n &= (\mathbf{E}^-)^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \left(\mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \mathbf{E}^n \right). \end{aligned}$$

Vertauschen wir jetzt die Rolle von \mathbf{E}^- und \mathbf{E}^+ ergibt sich (5.2b) – (5.2d), woraus die Behauptung folgt. \square

Im nächsten Abschnitt werden wir an numerischen Experimenten in 1D sehen, dass das in Kapitel 4 erwähnte Stabilitätsproblem auftritt, wenn man nicht wie bei der geglätteten Impulsmethode Filter-Funktionen verwendet. Bevor wir hierauf genauer eingehen, wird zunächst die Ortsdiskretisierung in 1D erklärt. Dann wird an einem in Matlab implementierten Verfahren gezeigt, dass die Reflektion und Brechung eines Laserpulses korrekt simuliert werden.

5.2 1D

Wir betrachten nur die Y -Polarisation und haben damit die Variablen E_x , E_y , p_x , p_y und B_z . Damit reduziert sich (5.1) auf

$$\begin{bmatrix} p'_x \\ p'_y \\ E'_x \\ E'_y \\ B'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ \omega_p^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_p^2 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ E_x \\ E_y \\ B_z \end{bmatrix}. \quad (5.4)$$

Um die Ortsdiskretisierung zu motivieren, betrachten wir zunächst die Eigenwerte der Matrix

$$S = \begin{bmatrix} 0 & -I & 0 \\ \Omega^2 & 0 & Y^T \\ 0 & X & 0 \end{bmatrix},$$

mit einer symmetrisch positiv semidefiniten Matrix $\Omega \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $I \in \mathbb{R}^{p \times p}$ und $X, Y \in \mathbb{R}^{q \times p}$.

Satz 5.2: Ist $-Y^T X$ positiv semidefinit, dann sind die Eigenwerte der Matrix S rein imaginär.

Beweis: Sei λ ein Eigenwert und $v^T = [v_1, v_2, v_3]$, $v_1, v_2 \in \mathbb{R}^{1 \times p}$, $v_3 \in \mathbb{R}^{1 \times q}$ ein Eigenvektor von S . Dann gilt

$$\begin{aligned} -v_2 &= \lambda v_1 \\ \Omega^2 v_1 + Y^T v_3 &= \lambda v_2 \\ X v_2 &= \lambda v_3. \end{aligned}$$

Multiplikation der zweiten Gleichung mit λ und Einsetzen der beiden anderen Gleichungen zeigt, dass λ^2 ein Eigenwert der Matrix $-(\Omega^2 - Y^T X)$ ist, welche nach Voraussetzung symmetrisch und negativ semidefinit ist. Also gilt $\lambda^2 \in \mathbb{R}$ und $\lambda^2 \leq 0$, woraus die Behauptung folgt. \square

Wir erhalten also ein stabiles Verfahren, wenn wir die Ortsdiskretisierung so wählen, dass die Matrix S in dem System $u' = Su$ die Voraussetzung des Satzes erfüllt. Denn für eine orthogonal diagonalisierbare Matrix S mit $Q^{-1}SQ = \Lambda$ lässt sich das System, mit $v := Q^{-1}u$ und $v^0 = Q^{-1}u^0$, in $v' = \Lambda v$ umschreiben. Die Lösung dieses diagonalen Systems ist durch $v(t) = e^{\Lambda t}v^0$ gegeben und es gilt $\|v(t)\| \leq \max_{\lambda \in \lambda(S)} |e^{\lambda t}| \|v_0\|$. Also bleibt die Lösung beschränkt, wenn $\max_{\lambda \in \lambda(S)} |e^{\lambda t}| \leq 1$ gilt.

Wir wählen ein geschachteltes Gitter mit Ortsschrittweite h_x und den Gitterpunkten $x_j = jh_x$, $j = 0, \dots, m$. Die Unbekannten sind $(E_\alpha)_j^n$, $\alpha = x, y$, $j = 1, \dots, m$, $(p_\alpha)_j^n$, $\alpha = x, y$, $j = 1, \dots, m$, $(B_z)_{j+\frac{1}{2}}^n$, $j = 0, \dots, m-1$ und wir verwenden absorbierende Randbedingungen, welche am Ende dieses Abschnitts erklärt werden. Definiert man

$$u := \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ E_x \\ E_y \\ B_z \end{bmatrix}_j \in \mathbb{R}^{5m},$$

so erhält man eine Matrix der Form

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I & 0 \\ \Omega^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Omega^2 & 0 & 0 & -X_B \\ 0 & 0 & 0 & -X_E & 0 \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

mit $\Omega = \text{diag}((\omega_p)_1, \dots, (\omega_p)_m)$ und den Matrizen X_E , X_B , welche die Ortsableitung approximieren.

Für die Approximationen an die Ortsableitungen wählen wir zentrale finite Differenzen

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x} B_z\right)_j &\approx \frac{1}{h_x} ((B_z)_{j+\frac{1}{2}} - (B_z)_{j-\frac{1}{2}}), \\ \left(\frac{\partial}{\partial x} E_y\right)_{j+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_x} ((E_y)_{j+1} - (E_y)_j), \end{aligned}$$

denn wählt man Vorwärts- oder Rückwärtsdifferenzen und lässt die Variablen auf demselben Gitter leben, hat die zugehörige Diskretisierungsmatrix nicht die gewünschten Eigenschaften. Das Verfahren wäre also instabil und man erhält zusätzlich Phasenverschiebungen in der Lösung. Damit haben die Matrizen $X_E \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $X_B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ die Form

$$X_B = \frac{1}{h_x} \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -1 & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad X_E = \frac{1}{h_x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & -1 \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

und es gilt $X_B = -X_E^T$.

Korollar 5.3: Die Matrix S aus (5.5) mit (5.6) hat rein imaginäre Eigenwerte.

Beweis: Die Behauptung folgt sofort aus Satz 5.2 mit $X = [0, -X_E]$, $Y = [0, -X_B^T]$ und $X_B = -X_E^T$. Denn dann gilt $X = -Y$. \square

Mit dieser Diskretisierung erhalten wir also ein stabiles Verfahren.

Das Schema ist durch

$$\begin{aligned} (B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= (B_z)_{j+\frac{1}{2}}^n - \frac{\tau}{2h} ((E_y)_{j+1}^n - (E_y)_j^n), \quad j = 0, \dots, m-1 \\ (E_x^+)_{j+1}^n &= (E_x)_j^n \\ (E_y^+)_{j+1}^n &= (E_y)_j^n - \frac{\tau}{2h} \left((B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (B_z)_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right), \quad j = 1, \dots, m \\ \begin{bmatrix} (p_\alpha)_j^{n+1} \\ (E_\alpha^-)_j^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau(\omega_p)_j^n & \tau \operatorname{sinc} \tau(\omega_p)_j^n \\ -(\omega_p)_j^n \sin \tau(\omega_p)_j^n & \cos \tau(\omega_p)_j^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (p_\alpha)_j^n \\ (E_\alpha^+)_j^n \end{bmatrix}, \quad \alpha = x, y \\ (E_x)_j^{n+1} &= (E_x^-)_j^{n+1} \\ (E_y)_j^{n+1} &= (E_y^-)_j^{n+1} - \frac{\tau}{2h} \left((B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (B_z)_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad j = 1, \dots, m \\ (B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= (B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h} ((E_y)_{j+1}^{n+1} - (E_y)_j^{n+1}) \quad j = 0, \dots, m-1 \end{aligned} \quad (5.7)$$

gegeben.

Um absorbierende Randbedingungen zu konstruieren, definieren wir an beiden Seiten k zusätzliche Gitterpunkte. In der Literatur wird die hier verwendete Technik perfectly matched layer (PML) genannt [12, 4]. Daher bezeichnen wir diese Gitterpunkte im Folgenden als PML-Punkte. Abbildung 5.1 zeigt das Gitter mit den PML-Punkten. Die Idee ist die Gleichungen so zu modifizieren, dass der Laserpuls am Rand trotz der Nullrandbedingungen nicht reflektiert, sondern in der PML-Schicht weiterläuft und gedämpft wird. Hierzu führen wir wie in [4] einen Dämpfungskoeffizienten $\sigma(x)$ ein und schreiben die Gleichungen für E_y und B_z als

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma(x)E_y &= -\frac{\partial B_z}{\partial x} + \omega_p^2 p_y \\ \frac{\partial B_z}{\partial t} + \sigma(x)B_z &= -\frac{\partial E_y}{\partial x}.\end{aligned}$$

Mit der Funktion

$$\sigma(x_j) = \begin{cases} 0 & j = 0, \dots, m \\ \kappa, & \text{sonst} \end{cases},$$

wobei κ eine Konstante ist. Die Ausbreitung von Wellen wird durch diese Gleichungen genauso beschrieben wie durch die ursprünglichen Maxwellgleichungen, mit der Ausnahme, dass sich die Dämpfung in der PML-Schicht durch κ steuern lässt. Für die Zeitdiskretisierung setzen wir

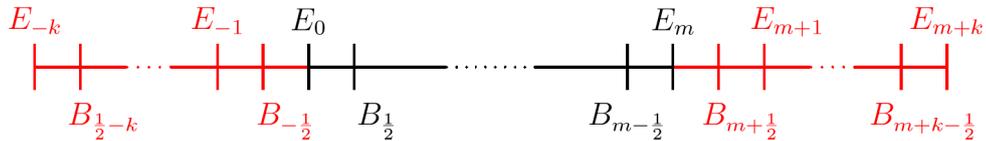


Abbildung 5.1: Eindimensionales Ortsdiskretisierungsgitter mit PML-Punkten.

$$\begin{aligned}
\frac{B_z^{n+\frac{1}{2}} - B_z^n}{\tau/2} + \sigma(x)B_z^n &= -\frac{\partial E_y^n}{\partial x} \\
\frac{(E_y^+)^n - E_y^n}{\tau/2} + \sigma(x)E_y^n &= -\frac{\partial B_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} \\
\frac{(E_y^+)^{n+1} - (E_y^-)^{n+1}}{\tau/2} + \sigma(x)(E_y^+)^n &= -\frac{\partial B_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} \\
\frac{B_z^{n+1} - B_z^{n+\frac{1}{2}}}{\tau/2} + \sigma(x)B_z^{n+\frac{1}{2}} &= -\frac{\partial E_y^{n+1}}{\partial x}.
\end{aligned}$$

Die Lösung der Gleichungen auf den regulären Gitterpunkten ist somit identisch zu (5.7). Für die Lösung auf den PML-Punkten ergibt sich

$$\begin{aligned}
(B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \left(\frac{2}{\tau} + \kappa\right)^{-1} \left(\frac{2}{\tau}(B_z)_{j+\frac{1}{2}}^n - ((E_y)_{j+1}^n - (E_y)_j^n)\right), \\
j &= -k, \dots, -1 \quad \text{und} \quad j = m, \dots, m+k-1 \\
(E_y^+)_j^n &= \left(\frac{2}{\tau} + \kappa\right)^{-1} \left(\frac{2}{\tau}(E_y)_j^n - ((B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (B_z)_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})\right), \\
j &= -k, \dots, -1 \quad \text{und} \quad j = m+1, \dots, m+k \\
(E_y)_j^{n+1} &= \left(\frac{2}{\tau} + \kappa\right)^{-1} \left(\frac{2}{\tau}(E_y^-)_{j+1}^{n+1} - ((B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - (B_z)_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})\right), \\
j &= -k, \dots, -1 \quad \text{und} \quad j = m+1, \dots, m+k \\
(B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \left(\frac{2}{\tau} + \kappa\right)^{-1} \left(\frac{2}{\tau}(B_z)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - ((E_y)_{j+1}^{n+1} - (E_y)_j^{n+1})\right), \\
j &= -k, \dots, -1 \quad \text{und} \quad j = m, \dots, m+k-1.
\end{aligned}$$

Dieses Verfahren wurde in Matlab implementiert und getestet. Den Laserpuls initialisieren wir als Anfangsbedingung

$$\begin{aligned}
(E_y)_j^0 &= a_0 \exp\left(\frac{-(x_j - x_c)^2}{2l^2}\right) \cos(x_j - x_c), \quad j = 1, \dots, m, \\
(B_z)_{j+\frac{1}{2}}^0 &= a_0 \exp\left(\frac{-(x_{j+\frac{1}{2}} - x_c)^2}{2l^2}\right) \cos(x_j - x_c), \quad j = 0, \dots, m-1.
\end{aligned}$$

Das Simulationsgebiet ist das Intervall $[0, 300]$ mit einer Gitterweite von 0.5. Wir testen zum einen die Reflektion an einem hochdichten Plasma mit $\rho_h = 10^8 \rho_c$ und 15 zusätzlichen PML-Punkten am linken Rand, um den Laserpuls zu dämpfen, wenn er den Rand erreicht. Zum anderen die Brechung des Laserpulses an einem Plasma mit $\rho_h = 0.8 \rho_c$ und 15 PML-Punkten in beide Richtungen.

In beiden Simulationen hat sich $\kappa = 0.25$ als geeignete Wahl herausgestellt. Die Amplitude des Laserpulses beträgt $a_0 = 0.05$, das Zentrum liegt bei $x_c = 80$ und er hat die Länge $l = 15$. Wir wählen eine dünne Plasmaschicht, welche bei 180 beginnt und bei 182 endet.

Abbildung 5.2 zeigt Ausschnitte der Simulation mit dem hochdichten Plasma. Der Laserpuls breitet sich im Vakuum unverändert aus, läuft auf das hochdichte Plasma zu, wird komplett reflektiert und hat die gleiche Form wie zuvor. Sobald er den linken Rand erreicht, wird der Laserpuls gedämpft und nicht vom Rand reflektiert.

Abbildung 5.3 zeigt Ausschnitte der Simulation mit dem niedrigdichten Plasma. Zur Anschauung ist hier die PML-Schicht auch dargestellt. Ein Teil des Laserpulses wird reflektiert und ein Teil propagiert durch die dünne Plasmaschicht. Man sieht, dass beide Teile in der PML-Schicht gedämpft werden, sobald sie die Ränder des Simulationsgebiets erreichen.

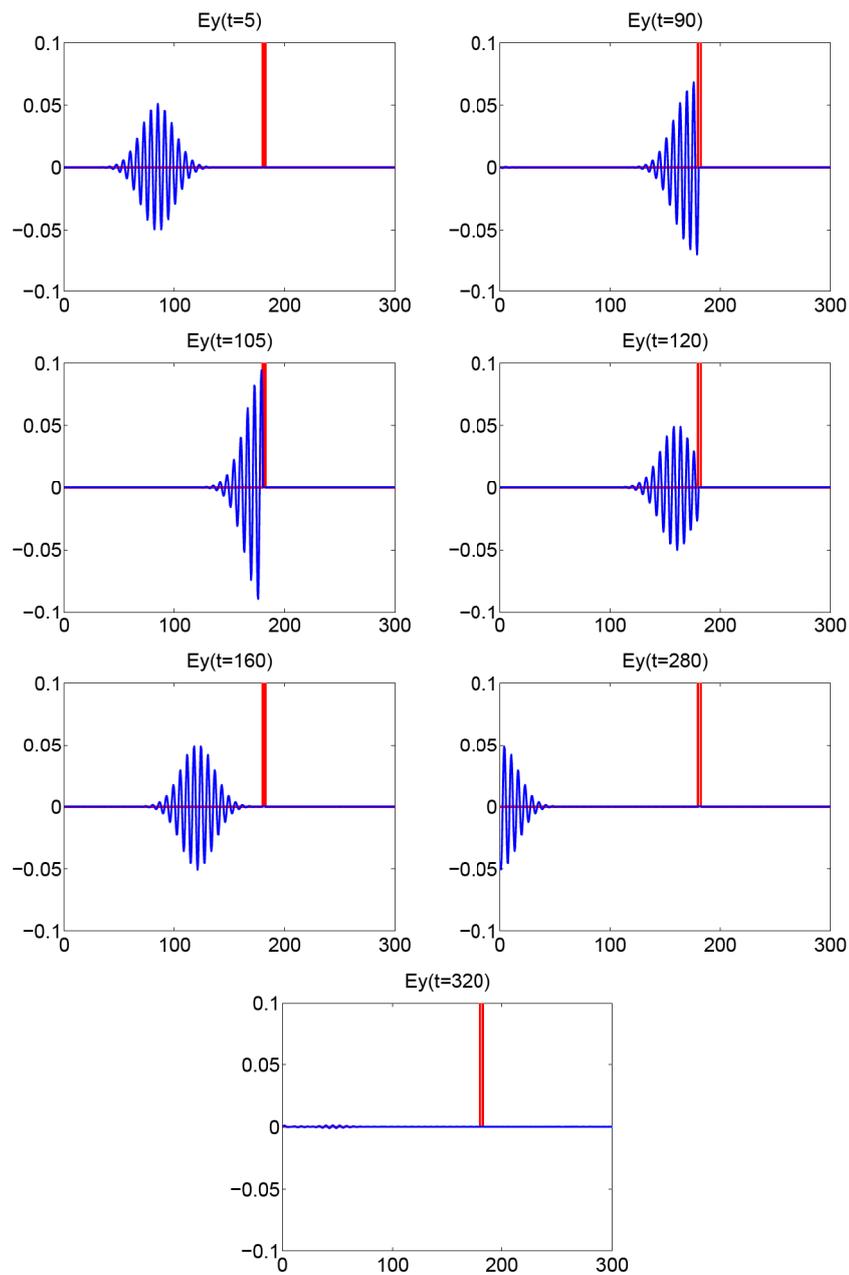


Abbildung 5.2: Ausschnitte einer Simulation mit einem hochdichten Plasma, $\rho_h = 10^8 \rho_c$, und PML-Punkten am linken Rand des Simulationsgebiets zur Dämpfung des Laserpulses.

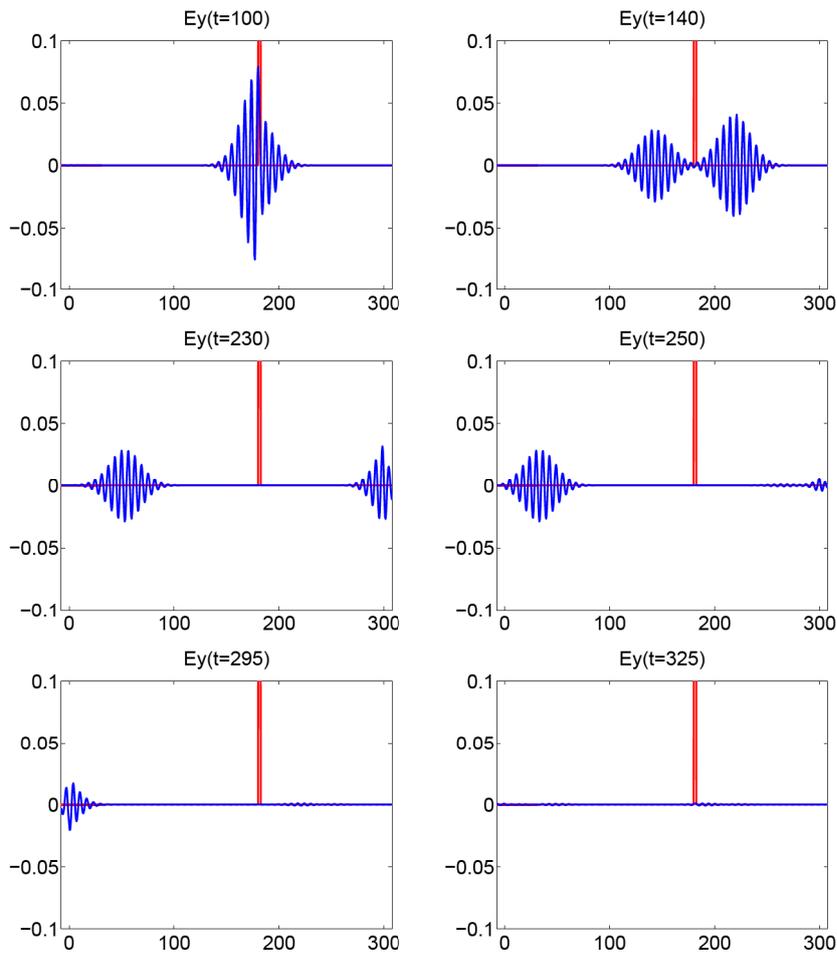


Abbildung 5.3: Ausschnitte einer Simulation mit einem niedrigdichten Plasma, $\rho_h = 0.8\rho_c$, und PML-Punkten an beiden Seiten zur Dämpfung des Laserpulses am Rand des Simulationsgebiets.

Betrachtet man allerdings die Ordnung des Verfahrens zeigt sich, dass es nicht wie gewünscht Ordnung 2 hat. Abbildung 5.4 zeigt den Fehler geplottet über die Schrittweite für 801 Schrittweiten zwischen 0.1 und 0.5. Die rote Linie zeigt Ordnung 2. Man sieht, für die meisten Schrittweiten wird der erwünschte Fehler erreicht, aber insgesamt hat das Verfahren Ordnung 0.

Um Ordnung 2 zu erreichen, greifen wir die Idee der Filter-Funktionen aus dem vorigen Kapitel auf und ersetzen in (5.2)

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} &\longrightarrow \psi_B(\tau\omega_p)\nabla \times \phi_E(\tau\omega_p)\mathbf{E}, \\ \nabla \times \mathbf{B} &\longrightarrow \psi_E(\tau\omega_p)\nabla \times \phi_B(\tau\omega_p)\mathbf{B}.\end{aligned}$$

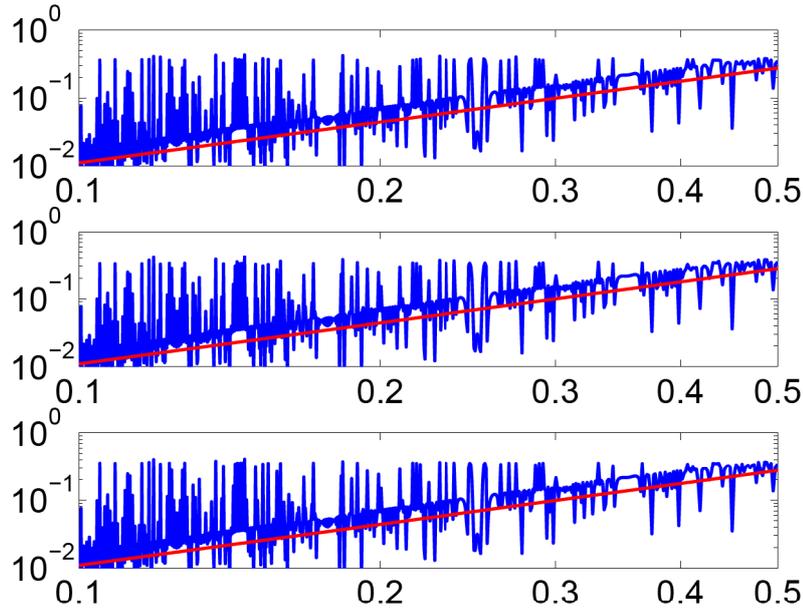


Abbildung 5.4: Norm der Fehler von E_y , B_z und p_y geplottet über die Schrittweite. Ohne Filter-Funktionen.

Damit ergibt sich das Schema

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}} &= \mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \psi_B(\tau\omega_p^n) (\nabla \times \phi_E(\tau\omega_p^n) \mathbf{E}^n) \\
 (\mathbf{E}^+)^n &= \mathbf{E}^n + \frac{\tau}{2} \psi_E(\tau\omega_p^n) (\nabla \times \phi_B(\tau\omega_p^n) \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}}) \\
 \begin{bmatrix} \mathbf{p}^{n+1} \\ (\mathbf{E}^-)^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau\omega_p^n & \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p^n \\ -\omega_p^n \sin \tau\omega_p^n & \cos \tau\omega_p^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}^n \\ (\mathbf{E}^+)^n \end{bmatrix} \\
 \mathbf{E}^{n+1} &= (\mathbf{E}^-)^{n+1} + \frac{\tau}{2} \psi_E(\tau\omega_p^n) (\nabla \times \phi_B(\tau\omega_p^n) \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}}) \\
 \mathbf{B}^{n+1} &= \mathbf{B}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2} \psi_B(\tau\omega_p^n) (\nabla \times \phi_E(\tau\omega_p^n) \mathbf{E}^{n+1}).
 \end{aligned}$$

Allerdings ist nicht ganz klar, wie man die Filter-Funktionen wählt.

5.2.1 Wahl der Filter-Funktionen

Damit die Näherungen an das Magnetfeld (2.1d) erfüllen, also divergenzfrei sind, wählen wir $\psi_B \equiv 1$. Für die Wahl der anderen Filter-Funktionen be-

trachten wir die exakte Lösung

$$u(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{bmatrix}.$$

(5.1) lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{p}'(t) \\ \mathbf{E}'(t) \\ \mathbf{B}'(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ \omega_p^2 & 0 & \nabla \times \\ 0 & -\nabla \times & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ \omega_p^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nabla \times \\ 0 & -\nabla \times & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{bmatrix} \\ &=: Gu(t) + g(u(t)). \end{aligned}$$

Für die exakte Lösung folgt mit der Variation-der-Konstanten-Formel

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t + \tau) \\ \mathbf{E}(t + \tau) \\ \mathbf{B}(t + \tau) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p & 0 \\ -\omega_p \sin \tau \omega_p & \cos \tau \omega_p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{bmatrix} \\ &+ \int_0^\tau \begin{bmatrix} \cos(\tau - s)\omega_p & (\tau - s)\operatorname{sinc}(\tau - s)\omega_p & 0 \\ -\omega_p \sin(\tau - s)\omega_p & \cos(\tau - s)\omega_p & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} g(u(t + s)) ds. \end{aligned}$$

Mit

$$R(\tau \omega_p) := \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p \\ -\omega_p \sin \tau \omega_p & \cos \tau \omega_p \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad D := \begin{bmatrix} 0 \\ \nabla \times \end{bmatrix}$$

und nochmaliger Anwendung der Variation-der-Konstanten-Formel folgt

$$\begin{aligned} u(t + \tau) &= \begin{bmatrix} R(\tau \omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u(t) + \int_0^\tau \begin{bmatrix} R((\tau - s)\omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} g(u(t + s)) ds \\ &= \begin{bmatrix} R(\tau \omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u(t) + \int_0^\tau \begin{bmatrix} R((\tau - s)\omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{bmatrix} \\ &\left(\begin{bmatrix} R(s\omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u(t) + \int_0^s \begin{bmatrix} R((s - \sigma)\omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & D \\ -D^T & 0 \end{bmatrix} u(t + \sigma) d\sigma \right) ds \\ &= \begin{bmatrix} R(\tau \omega_p) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u(t) + \int_0^\tau \begin{bmatrix} 0 & R((\tau - s)\omega_p)D \\ -D^T R(s\omega_p) & 0 \end{bmatrix} u(t) ds + d_{n+1}, \end{aligned}$$

wobei

$$d_{n+1} = \int_0^\tau \begin{bmatrix} 0 & R((\tau-s)\omega_p)D \\ -D^T & 0 \end{bmatrix} \int_0^s \begin{bmatrix} 0 & R((s-\sigma)\omega_p)D \\ -D^T & 0 \end{bmatrix} u(t+\sigma) d\sigma ds.$$

Für das Integral gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^\tau \begin{bmatrix} 0 & R((\tau-s)\omega_p)D \\ -D^T R(s\omega_p) & 0 \end{bmatrix} ds \\ &= \int_0^\tau \begin{bmatrix} 0 & 0 & \omega_p^{-1} \sin(\tau-s)\omega_p \nabla \times \\ 0 & 0 & \cos(\tau-s)\omega_p \nabla \times \\ \nabla \times \omega_p \sin s\omega_p & -\nabla \times \cos s\omega_p & 0 \end{bmatrix} ds \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & \omega_p^{-2}(1-\cos \tau\omega_p) \nabla \times \\ 0 & 0 & \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p \nabla \times \\ \nabla \times (1-\cos \tau\omega_p) & -\tau \nabla \times \operatorname{sinc} \tau\omega_p & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

und d_{n+1} lässt sich als

$$\begin{aligned} & \int_0^\tau \int_0^s \begin{bmatrix} -R((\tau-s)\omega_p)DD^T & 0 \\ 0 & -D^T R((s-\sigma)\omega_p)D \end{bmatrix} u(t+\sigma) d\sigma ds \\ &= \int_0^\tau \int_0^s \begin{bmatrix} -(\tau-s) \operatorname{sinc}(\tau-s)\omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t+\sigma) \\ -\cos(\tau-s)\omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t+\sigma) \\ -\nabla \times \cos(s-\sigma)\omega_p \nabla \times \mathbf{B}(t+\sigma) \end{bmatrix} d\sigma ds \end{aligned}$$

schreiben. Daraus folgt

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t+\tau) \\ \mathbf{E}(t+\tau) \\ \mathbf{B}(t+\tau) \end{bmatrix} = \\ & \begin{bmatrix} \cos \tau\omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p & \omega_p^{-2}(1-\cos \tau\omega_p) \nabla \times \\ -\omega_p \sin \tau\omega_p & \cos \tau\omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p \nabla \times \\ \nabla \times (1-\cos \tau\omega_p) & -\tau \nabla \times \operatorname{sinc} \tau\omega_p & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{bmatrix} \\ & + \int_0^\tau \int_0^s \begin{bmatrix} -(\tau-s) \operatorname{sinc}(\tau-s)\omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t+\sigma) \\ -\cos(\tau-s)\omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t+\sigma) \\ -\nabla \times \cos(s-\sigma)\omega_p \nabla \times \mathbf{B}(t+\sigma) \end{bmatrix} d\sigma ds. \quad (5.8) \end{aligned}$$

Aus der Gleichung für \mathbf{E} folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2} + \xi) &= -\omega_p \sin \xi \omega_p \mathbf{p}(t + \frac{\tau}{2}) + \cos \xi \omega_p \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2}) \\ &+ \omega_p^{-1} \sin \xi \omega_p \nabla \times \mathbf{B}(t + \frac{\tau}{2}) \\ &- \int_0^\xi \int_0^s \cos(\xi-s)\omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2} + \sigma) d\sigma ds \end{aligned}$$

und die Identität

$$\mathbf{B}(t + \tau) = \mathbf{B}(t) + \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \mathbf{B}'(t + \frac{\tau}{2} + \xi) d\xi$$

liefert mit (2.3b)

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(t + \tau) &= \mathbf{B}(t) - \nabla \times \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2} + \xi) d\xi \\ &= \mathbf{B}(t) - \nabla \times \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left(-\omega_p \sin \xi \omega_p \mathbf{p}(t + \frac{\tau}{2}) \right. \\ &\quad \left. + \cos \xi \omega_p \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2}) + \omega_p^{-1} \sin \xi \omega_p \nabla \times \mathbf{B}(t + \frac{\tau}{2}) \right) d\xi + \tilde{\delta}_B \\ &= \mathbf{B}(t) - \tau \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau \omega_p}{2} \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2}) + \tilde{\delta}_B, \end{aligned} \quad (5.9)$$

wobei

$$\tilde{\delta}_B = \nabla \times \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \int_0^\xi \int_0^s \cos(\xi - s) \omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t + \frac{\tau}{2} + \sigma) d\sigma ds d\xi$$

mit

$$\|\tilde{\delta}_B\| \leq \tau^3 \max_{\xi + \tau/2, \sigma, s \in [0, \tau]} \|\nabla \times \cos(\xi - s) \omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t + \sigma)\|.$$

Mit $\psi_B \equiv 1$ folgt aus dem numerischen Schema

$$\mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \phi_E(\tau \omega_p^n) \mathbf{E}^n - \frac{\tau}{2} \nabla \times \phi_E(\tau \omega_p^n) \mathbf{E}^{n+1}.$$

Vergleicht man dies mit (5.9) motiviert das, mit der Approximation

$$\mathbf{E}(t_n + \frac{\tau}{2}) \approx \frac{\mathbf{E}(t_n) + \mathbf{E}(t_{n+1})}{2},$$

die Wahl $\phi_E(x) = \operatorname{sinc} \frac{x}{2}$. Die Wahl der anderen beiden Filter-Funktionen lässt sich nicht so einfach motivieren. Wir testen zunächst die Auswirkung dieser einen Filter-Funktion. Abbildung 5.5 zeigt den Fehler mit den Filter-Funktionen $\phi_E(x) = \operatorname{sinc} \frac{x}{2}$ und $\psi_E = \phi_B = \psi_B \equiv 1$. Man sieht, dass für \mathbf{B} und \mathbf{p} die gewünschte Ordnung bereits erreicht wird. Auch das elektrische Feld wird mit fast allen Schrittweiten gut approximiert. Abbildung 5.6 zeigt den Fehler für die naheliegende Wahl $\phi_E(x) = \psi_E(x) = \operatorname{sinc} \frac{x}{2}$ und $\phi_B = \psi_B \equiv 1$. Mit dieser Wahl wird Ordnung 2 erreicht.

Im nächsten Abschnitt betrachten wir den lokalen Fehler des Schemas mit dieser Wahl der Filter-Funktionen.

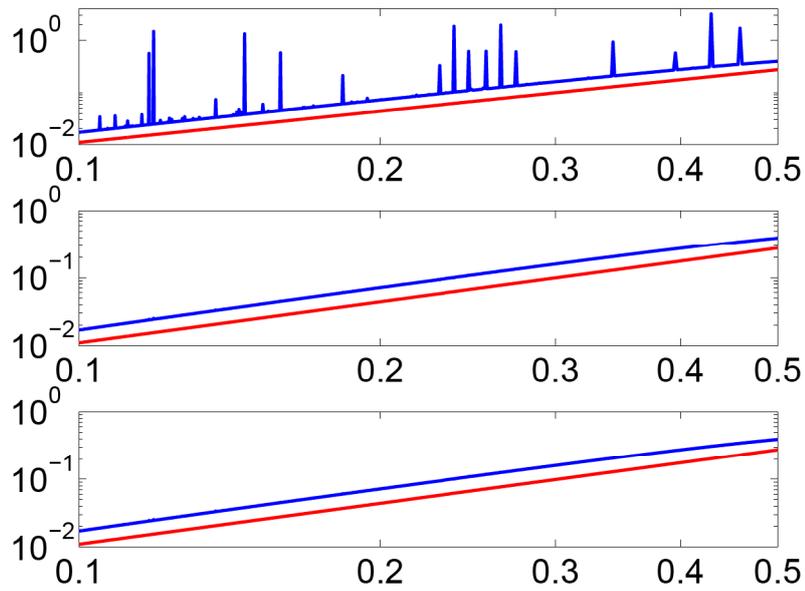


Abbildung 5.5: Norm der Fehler von E_y , B_z und p_y geplottet über die Schrittweite. Mit einer Filter-Funktion.

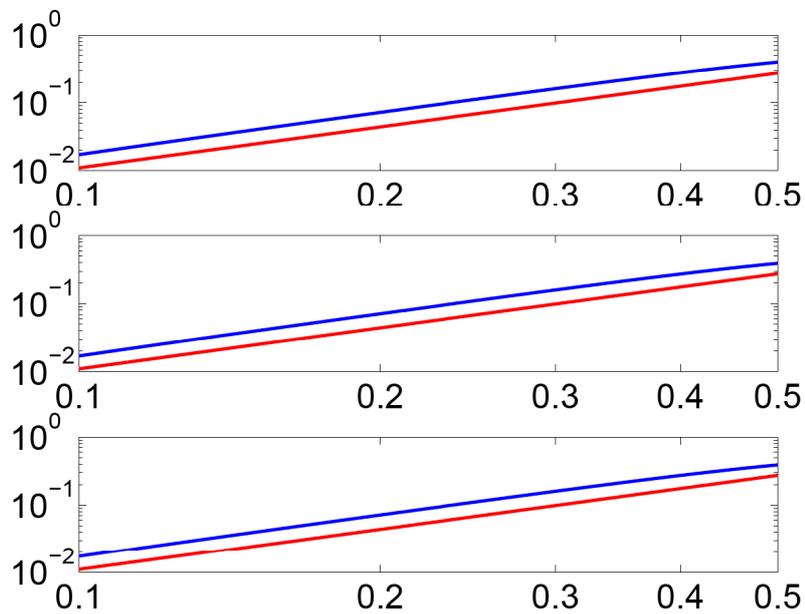


Abbildung 5.6: Norm der Fehler von E_y , B_z und p_y geplottet über die Schrittweite. Mit zwei Filter-Funktionen.

5.2.2 Lokaler Fehler

Betrachten wir nun den lokalen Fehler $e^{n+1} = [e_p^{n+1}, e_E^{n+1}, e_B^{n+1}]^T := u^{n+1} - u(t_{n+1})$. Für einen Zeitschritt des numerischen Schemas ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^{n+1} &= \cos \tau\omega_p \mathbf{p}^n + \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p \mathbf{E}^n + \frac{\tau^2}{2} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \cos \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \mathbf{B}^n \\ &\quad - \frac{\tau^3}{4} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \cos \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{E}^n, \end{aligned} \quad (5.10a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{n+1} &= -\omega_p \sin \tau\omega_p \mathbf{p}^n + \cos \tau\omega_p \mathbf{E}^n + \tau \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \cos^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \mathbf{B}^n \\ &\quad - \frac{\tau^2}{2} \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \cos^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{E}^n, \end{aligned} \quad (5.10b)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{n+1} &= \mathbf{B}^n - \nabla \times \tau \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \cos^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{E}^n \\ &\quad + \nabla \times 2 \sin^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \cos \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{p}^n \\ &\quad - \nabla \times \frac{\tau^2}{2} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \cos^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \mathbf{B}^n \\ &\quad + \nabla \times \frac{\tau^3}{4} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \cos^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{E}^n. \end{aligned} \quad (5.10c)$$

Mit (5.8) folgt

$$\begin{aligned} e_p^{n+1} &= \cos \tau\omega_p e_p^n + \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p e_E^n + \frac{\tau^2}{2} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times e_B^n + \delta_p^n, \\ e_E^{n+1} &= -\omega_p \sin \tau\omega_p e_p^n + \cos \tau\omega_p e_E^n + \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p e_B^n + \delta_E^n, \\ e_B^{n+1} &= \nabla \times 2 \sin^2 \frac{\tau\omega_p}{2} e_p^n - \tau \nabla \times \operatorname{sinc} \tau\omega_p e_E^n + e_B^n + \delta_B^n, \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} \delta_p^n &= \frac{\tau^2}{2} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} (\cos \frac{\tau\omega_p}{2} - 1) \nabla \times \mathbf{B}^n \\ &\quad - \frac{\tau^3}{4} \operatorname{sinc}^2 \frac{\tau\omega_p}{2} \cos \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{E}^n \\ &\quad + \int_0^\tau \int_0^s (\tau - s) \operatorname{sinc} (\tau - s) \omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t + \sigma) d\sigma ds, \\ \delta_E^n &= \tau \operatorname{sinc} \tau\omega_p (\cos \frac{\tau\omega_p}{2} - 1) \nabla \times \mathbf{B}^n \\ &\quad - \frac{\tau^2}{2} \operatorname{sinc} \tau\omega_p \cos \frac{\tau\omega_p}{2} \nabla \times \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau\omega_p}{2} \mathbf{E}^n \\ &\quad + \int_0^\tau \int_0^s \cos(\tau - s) \omega_p \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(t + \sigma) d\sigma ds, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\delta_B^n &= -\tau \nabla \times \operatorname{sinc} \tau \omega_p \left(\cos \frac{\tau \omega_p}{2} - 1 \right) \mathbf{E}^n + \nabla \times 2 \sin^2 \frac{\tau \omega_p}{2} \left(\cos \frac{\tau \omega_p}{2} - 1 \right) \mathbf{p}^n \\
&\quad - \frac{\tau^2}{2} \nabla \times \operatorname{sinc}^2 \tau \omega_p \nabla \times \mathbf{B}^n + \frac{\tau^3}{4} \nabla \times \operatorname{sinc}^2 \tau \omega_p \nabla \times \nabla \times \operatorname{sinc} \frac{\tau \omega_p}{2} \mathbf{E}^n \\
&\quad + \int_0^\tau \int_0^s \nabla \times \cos(s - \sigma) \omega_p \nabla \times \mathbf{B}(t + \sigma) d\sigma ds.
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich die Fehlerrekursion

$$e^{n+1} = A e^n + \delta^n = A^{n+1} e^0 + \sum_{k=0}^n A^k \delta^{n-k}$$

mit $\delta^n = [\delta_p^n, \delta_E^n, \delta_B^n]^T$ und

$$A = \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p & \omega_p^{-2} (1 - \cos \tau \omega_p) \nabla \times \\ -\omega_p \sin \tau \omega_p & \cos \tau \omega_p & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p \nabla \times \\ \nabla \times (1 - \cos \tau \omega_p) & -\tau \nabla \times \operatorname{sinc} \tau \omega_p & 1 \end{bmatrix}.$$

Eine Analyse des lokalen Fehlers wird in dieser Arbeit nicht diskutiert.

5.3 2D

In 2D hängen alle Variablen von (t, x, y) ab

$$\mathbf{V} = [V_x(t, x, y), V_y(t, x, y), V_z(t, x, y)]^T.$$

Wir betrachten wieder die Y-Polarisation und haben also wieder die Variablen E_x, E_y, B_z, p_x und p_y . In der Situation gilt in 2D

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} E_y - \frac{\partial}{\partial y} E_x \end{bmatrix}, \quad \nabla \times \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -\frac{\partial}{\partial y} B_z \\ \frac{\partial}{\partial x} B_z \\ 0 \end{bmatrix}$$

und wir erhalten das Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} p'_x \\ p'_y \\ E'_x \\ E'_y \\ B'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I & 0 \\ \omega_p^2 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & \omega_p^2 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ E_x \\ E_y \\ B_z \end{bmatrix}. \quad (5.11)$$

Um Stabilität zu erhalten, wählen wir zur Ortsdiskretisierung ein Yee-Gitter [46] mit Ortschaftweiten h_x, h_y und Gitterpunkten $x_j = jh_x, j = 0, \dots, J-1$, $y_l = lh_y, l = 0, \dots, L-1$. Abbildung 5.7 zeigt das Gitter und die Positionen der Variablen. Die Ortsableitungen approximieren wir wieder mit zentralen finiten Differenzen

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} \right)_{j,l} &\approx \frac{1}{h_x} \left((E_x)_{j+\frac{1}{2},l} - (E_x)_{j-\frac{1}{2},l} \right) \\ \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} \right)_{j,l} &\approx \frac{1}{h_y} \left((E_x)_{j,l+\frac{1}{2}} - (E_x)_{j,l-\frac{1}{2}} \right) \\ \left(\frac{\partial B_z}{\partial x} \right)_{j+\frac{1}{2},l} &\approx \frac{1}{h_x} \left((B_z)_{j+1,l} - (B_z)_{j,l} \right) \\ \left(\frac{\partial B_z}{\partial y} \right)_{j,l+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_y} \left((B_z)_{j,l+1} - (B_z)_{j,l} \right). \end{aligned}$$

Diese Wahl führt auf ein stabiles Verfahren, wie am Ende des Abschnitts gezeigt wird.

Zur Implementierung des 2D Schemas in Matlab definieren wir Matrizen für

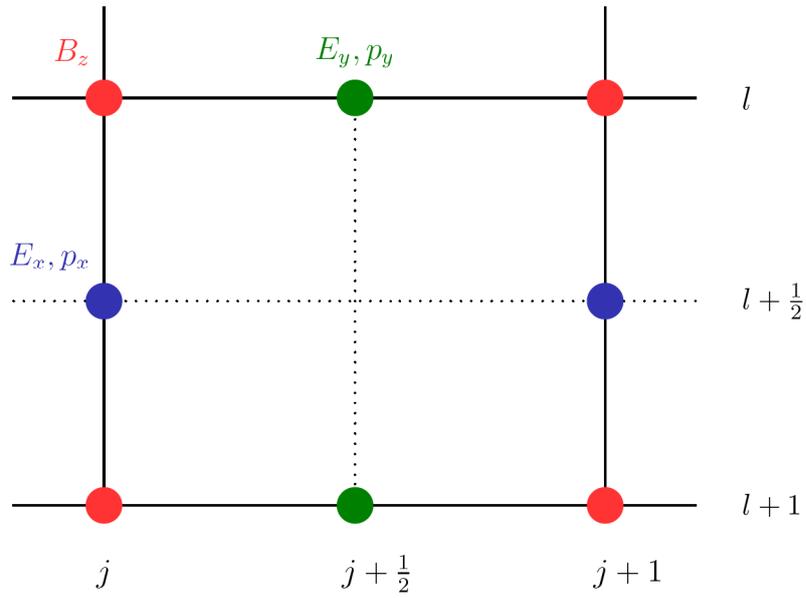


Abbildung 5.7: Positionen der Variablen in 2D

die Felder \mathbf{E} und \mathbf{B}

$$E_x = \begin{bmatrix} E_{1,\frac{1}{2}} & \cdots & E_{1,L-\frac{1}{2}} \\ \vdots & & \vdots \\ E_{J-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} & \cdots & E_{J-\frac{1}{2},L-\frac{1}{2}} \end{bmatrix}, \quad E_y = \begin{bmatrix} E_{\frac{1}{2},1} & \cdots & E_{\frac{1}{2},L-1} \\ \vdots & & \vdots \\ E_{J-\frac{1}{2},1} & \cdots & E_{J-\frac{1}{2},L-1} \end{bmatrix},$$

$$B_z = \begin{bmatrix} B_{1,1} & \cdots & B_{1,L-1} \\ \vdots & & \vdots \\ B_{J-1,1} & \cdots & B_{J-1,L-1} \end{bmatrix}.$$

Die Impulse \mathbf{p} leben auf dem gleichen Gitter wie die zugehörige Komponente des elektrischen Feldes und mit

$$X_B = \frac{1}{h_x} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad Y_B = \frac{1}{h_y} \begin{bmatrix} 1 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -1 \\ & & & 1 \end{bmatrix},$$

$$X_E = \frac{1}{h_x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & -1 \end{bmatrix}, \quad Y_E = \frac{1}{h_y} \begin{bmatrix} -1 & & & \\ 1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (5.12)$$

wobei $X_B \in \mathbb{R}^{J-1 \times J-1}$, $Y_B \in \mathbb{R}^{L-1 \times L-1}$, $X_E \in \mathbb{R}^{J-1 \times J-1}$ und $Y_E \in \mathbb{R}^{L-1 \times L-1}$, erhalten wir das Schema

$$\begin{aligned}
(B_z)^{n+\frac{1}{2}} &= (B_z)^n - \frac{\tau}{2} \left(X_E \left(\Phi_{E_y} \bullet (E_y)^n \right) + \left(\Phi_{E_x} \bullet (E_x)^n \right) Y_E \right) \\
(E_x^+)^n &= (E_x)^n - \frac{\tau}{2} \Psi_{E_x} \bullet \left((B_z)^{n+\frac{1}{2}} Y_B \right) \\
(E_y^+)^n &= (E_y)^n + \frac{\tau}{2} \Psi_{E_y} \bullet \left(X_B (B_z)^{n+\frac{1}{2}} \right) \\
\begin{bmatrix} (p_\alpha)^{n+1} \\ (E_\alpha^-)^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \tau \omega_p^n & \tau \operatorname{sinc} \tau \omega_p^n \\ -\omega_p^n \sin \tau \omega_p^n & \cos \tau \omega_p^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (p_\alpha)^n \\ (E_\alpha^+)^n \end{bmatrix}, \quad \alpha = x, y \\
(E_x^-)^{n+1} &= (E_x^-)^{n+1} - \frac{\tau}{2} \Psi_{E_x} \bullet \left((B_z)^{n+\frac{1}{2}} Y_B \right) \\
(E_y^-)^{n+1} &= (E_y^-)^{n+1} + \frac{\tau}{2} \Psi_{E_y} \bullet \left(X_B (B_z)^{n+\frac{1}{2}} \right) \\
(B_z)^{n+1} &= (B_z)^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2} \left(X_E \left(\Phi_{E_y} \bullet (E_y)^{n+1} \right) + \left(\Phi_{E_x} \bullet (E_x)^{n+1} \right) Y_E \right),
\end{aligned}$$

wobei \bullet ein punktweises Matrixprodukt bezeichnet und die Matrizen Φ_{E_x} , Φ_{E_y} , Ψ_{E_x} und Ψ_{E_y} auf demselben Gitter leben wie das zugehörige Feld

$$\begin{aligned}
\Phi_{E_x} = \Psi_{E_x} &= \begin{bmatrix} \phi(\tau(\omega_p^n)_{1, \frac{1}{2}}) & \cdots & \phi(\tau(\omega_p^n)_{1, L-\frac{1}{2}}) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi(\tau(\omega_p^n)_{J-1, \frac{1}{2}}) & \cdots & \phi(\tau(\omega_p^n)_{J-1, L-\frac{1}{2}}) \end{bmatrix}, \\
\Phi_{E_y} = \Psi_{E_y} &= \begin{bmatrix} \phi(\tau(\omega_p^n)_{\frac{1}{2}, 1}) & \cdots & \phi(\tau(\omega_p^n)_{\frac{1}{2}, L-1}) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi(\tau(\omega_p^n)_{J-\frac{1}{2}, 1}) & \cdots & \phi(\tau(\omega_p^n)_{J-\frac{1}{2}, L-1}) \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Dabei werden die gleichen Filter-Funktionen wie im vorigen Abschnitt verwendet

$$\phi(x) = \phi_E(x) = \psi_E(x) = \operatorname{sinc} \frac{x}{2}.$$

Zur Stabilitätsanalyse transformieren wir die Matrizen in Vektoren, um ein System in der herkömmlichen Form $u' = Su$ zu erhalten. Hierzu verwenden wir die vec Operation.

Definition: Für eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{C}^{n,m}$ sei vec die Operation, die A den Vektor der Länge nm zuordnet

$$\operatorname{vec} A = [a_{11}, \dots, a_{n1}, a_{12}, \dots, a_{n2}, \dots, a_{1m}, \dots, a_{nm}]^T.$$

Für drei beliebige Matrizen $A \in \mathbb{C}^{n,m}$, $B \in \mathbb{C}^{m,p}$ und $C \in \mathbb{C}^{p,r}$ gilt die Identität $\text{vec}(ABC) = (C^T \otimes A)\text{vec}B$. Dabei bezeichnet \otimes das Kroneckerprodukt.

Schreiben wir die Ortsdiskretisierung von (5.11) als

$$\begin{aligned} p'_x &= -E_x \\ p'_y &= -E_y \\ E'_x &= \Omega^2 p_x I + I B_z Y_B \\ E'_y &= \Omega^2 p_y I - X_B B_z I \\ B'_z &= I E_x Y_E - X_E E_y I, \end{aligned}$$

wenden die Operation vec und obige Identität an, erhalten wir das System

$$\begin{bmatrix} p'_x \\ p'_y \\ E'_x \\ E'_y \\ B'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I & 0 \\ I \otimes \Omega^2 & 0 & 0 & 0 & Y_B^T \otimes I \\ 0 & I \otimes \Omega^2 & 0 & 0 & -I \otimes X_B \\ 0 & 0 & Y_E^T \otimes I & -I \otimes X_E & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ E_x \\ E_y \\ B_z \end{bmatrix} =: S \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ E_x \\ E_y \\ B_z \end{bmatrix}, \quad (5.13)$$

wobei die Variablen jetzt die vektorisierten Matrizen bezeichnen.

Korollar 5.4: Die Matrix S aus (5.13) mit (5.12) hat rein imaginäre Eigenwerte.

Beweis: Wir wenden Satz 5.2 an. Die Matrix $I \otimes \Omega^2$ ist symmetrisch und positiv semidefinit. Die Matrizen X und Y aus Satz 5.2 sind durch

$$X = [Y_E^T \otimes I, -I \otimes X_E] \quad \text{und} \quad Y = [Y_B \otimes I, -I \otimes X_B^T]$$

gegeben und es gilt $X_B = -X_E^T$, $Y_B = -Y_E^T$. Daraus folgt sofort $X = -Y$ und damit die Behauptung. \square

5.4 3D

In diesem Abschnitt wird die Ortsdiskretisierung in 3D erklärt, welche dann im C++ Code H-VLPL implementiert wurde. In 3D hängen alle Variablen von (t, x, y, z) ab

$$\mathbf{V} = [V_x(t, x, y, z), V_y(t, x, y, z), V_z(t, x, y, z)]^T.$$

Also betrachten wir jetzt im Gegensatz zu den beiden vorigen Abschnitten den vollen Satz an Gleichungen und alle drei Komponenten. Die Rotation der Felder ist durch

$$\nabla \times \mathbf{V} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial y} V_z - \frac{\partial}{\partial z} V_y \\ \frac{\partial}{\partial z} V_x - \frac{\partial}{\partial x} V_z \\ \frac{\partial}{\partial x} V_y - \frac{\partial}{\partial y} V_x \end{bmatrix}$$

gegeben und damit erhalten wir das Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} p'_x \\ p'_y \\ p'_z \\ E'_x \\ E'_y \\ E'_z \\ B'_x \\ B'_y \\ B'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ \omega_p^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & \omega_p^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & \omega_p^2 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & -\frac{\partial}{\partial y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ E_x \\ E_y \\ E_z \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

Wir lösen die Gleichungen wieder auf dem Yee-Gitter [46] und approximieren die Ortsableitungen mit zentralen finiten Differenzen. Die Ortsschrittweiten bezeichnen wir mit h_x , h_y und h_z und die Gitterpunkte mit $x_j = jh_x$, $j = 0, \dots, J - 1$, $y_l = lh_y$, $l = 0, \dots, L - 1$ und $z_m = mh_z$, $m = 0, \dots, M - 1$. Das geschachtelte Gitter und die Positionen der Variablen sind in Abbildung 5.8 dargestellt. Zwei ineinander verschachtelte Würfel, einer für das \mathbf{E} -Feld und einer für das \mathbf{B} -Feld. Die beiden Würfel sind so ineinander verschachtelt, dass jeweils der Mittelpunkt einer Kante des einen Würfels im Mittelpunkt einer Fläche des anderen liegt. Also hat jede Oberfläche eines Würfels 4 Freiheitsgrade von \mathbf{E} oder \mathbf{B} auf den Kanten und einen der anderen Variablen in der Mitte der Fläche, was in Abbildung 5.9 veranschaulicht ist.

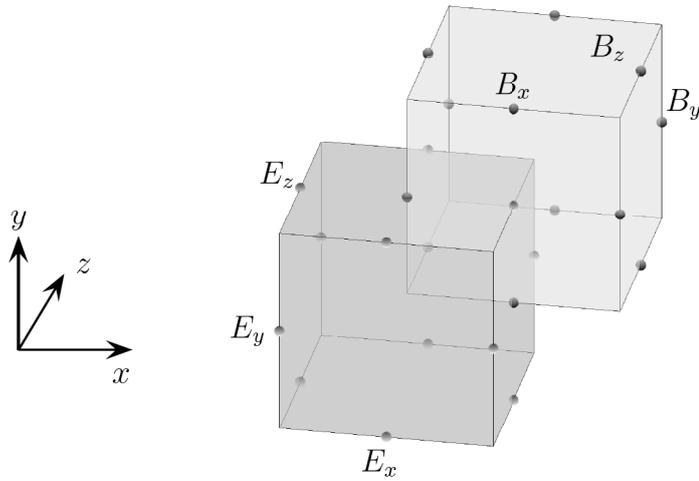


Abbildung 5.8: Geschachteltes Gitter für das finite Differenzschema und die Positionen der Variablen.

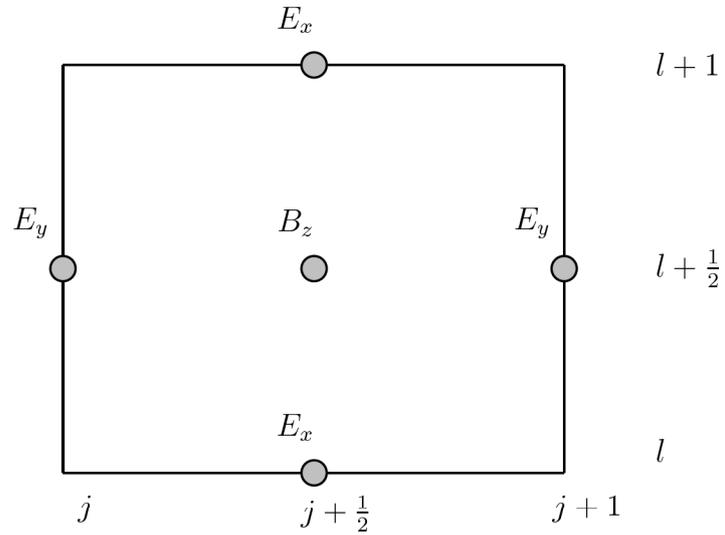


Abbildung 5.9: Beispiel für eine Oberfläche der Würfel.

Das finite Differenzenschema für die Ortsableitungen sieht folgendermaßen aus

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial E_y}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},m} &\approx \frac{1}{h_x} \left((E_y)_{j+1,l+\frac{1}{2},m} - (E_y)_{j,l+\frac{1}{2},m} \right) \\
\left(\frac{\partial E_z}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2},l,m+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_x} \left((E_z)_{j+1,l,m+\frac{1}{2}} - (E_z)_{j,l,m+\frac{1}{2}} \right) \\
\left(\frac{\partial E_x}{\partial y}\right)_{j+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},m} &\approx \frac{1}{h_y} \left((E_x)_{j+\frac{1}{2},l+1,m} - (E_x)_{j+\frac{1}{2},l,m} \right) \\
\left(\frac{\partial E_z}{\partial y}\right)_{j,l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_y} \left((E_z)_{j,l+1,m+\frac{1}{2}} - (E_z)_{j,l,m+\frac{1}{2}} \right) \\
\left(\frac{\partial E_x}{\partial z}\right)_{j+\frac{1}{2},l,m+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_z} \left((E_x)_{j+\frac{1}{2},l,m+1} - (E_x)_{j+\frac{1}{2},l,m} \right) \\
\left(\frac{\partial E_y}{\partial z}\right)_{j,l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_z} \left((E_y)_{j,l+\frac{1}{2},m+1} - (E_y)_{j,l+\frac{1}{2},m} \right) \\
\left(\frac{\partial B_y}{\partial x}\right)_{j,l,m+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_x} \left((B_y)_{j+\frac{1}{2},l,m+\frac{1}{2}} - (B_y)_{j-\frac{1}{2},l,m+\frac{1}{2}} \right) \\
\left(\frac{\partial B_z}{\partial x}\right)_{j,l+\frac{1}{2},m} &\approx \frac{1}{h_x} \left((B_z)_{j+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},m} - (B_z)_{j-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},m} \right) \\
\left(\frac{\partial B_x}{\partial y}\right)_{j,l,m+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{h_y} \left((B_x)_{j,l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} - (B_x)_{j,l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} \right) \\
\left(\frac{\partial B_z}{\partial y}\right)_{j+\frac{1}{2},l,m} &\approx \frac{1}{h_y} \left((B_z)_{j+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2},m} - (B_z)_{j+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},m} \right) \\
\left(\frac{\partial B_x}{\partial z}\right)_{j,l+\frac{1}{2},m} &\approx \frac{1}{h_z} \left((B_x)_{j,l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} - (B_x)_{j,l+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}} \right) \\
\left(\frac{\partial B_y}{\partial z}\right)_{j+\frac{1}{2},l,m} &\approx \frac{1}{h_z} \left((B_y)_{j+\frac{1}{2},l,m+\frac{1}{2}} - (B_y)_{j+\frac{1}{2},l,m-\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned}$$

Wir ordnen die Lösung jeder Komponente von \mathbf{p} , \mathbf{E} und \mathbf{B} am Gitterpunkt (x_j, y_l, z_m) in einem Vektor der Länge JLM an, wobei dem Gitterpunkt (x_j, y_l, z_m) der N -te Eintrag, mit $N = j + lJ + mJL$, entspricht. Schreibt man dann alle 9 Komponenten untereinander in einen Vektor u erhalten wir

$$u = u(t, x_j, y_l, z_m) := \begin{bmatrix} \mathbf{p}(t, x_j, y_l, z_m) \\ \mathbf{E}(t, x_j, y_l, z_m) \\ \mathbf{B}(t, x_j, y_l, z_m) \end{bmatrix}_{j,l,m} \in \mathbb{R}^{9JLM}.$$

Daraus resultiert wieder ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Form $u' = Su$ und mit obigen finiten Differenzen die Matrix

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -I & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -I & 0 & 0 & 0 \\ \Omega^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Z_B & Y_B \\ 0 & \Omega^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & Z_B & 0 & -X_B \\ 0 & 0 & \Omega^2 & 0 & 0 & 0 & -Y_B & X_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Z_E & -Y_E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -Z_E & 0 & X_E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Y_E & -X_E & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (5.15)$$

wobei $\Omega = \text{diag}((\omega_p)_{0,0,0}, \dots, (\omega_p)_{J-1,L-1,M-1})$,

$$\begin{aligned} X_E &= \frac{1}{h_x} D_J \otimes I_L \otimes I_M, & X_B &= \frac{1}{h_x} \tilde{D}_J \otimes I_L \otimes I_M, \\ Y_E &= \frac{1}{h_y} I_J \otimes D_L \otimes I_M, & Y_B &= \frac{1}{h_y} I_J \otimes \tilde{D}_L \otimes I_M, \\ Z_E &= \frac{1}{h_z} I_J \otimes I_L \otimes D_M, & Z_B &= \frac{1}{h_z} I_J \otimes I_L \otimes \tilde{D}_M. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet \otimes das Kroneckerprodukt, I_k die $k \times k$ Identitätsmatrix, $D_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ die Matrix

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -1 \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

und $\tilde{D}_k = -D_k^T$. Damit sind X_E, X_B, Y_E, Y_B, Z_E und $Z_B \in \mathbb{R}^{JLM \times JLM}$ und es gilt

$$X_B = -X_E^T, \quad Y_B = -Y_E^T \quad \text{and} \quad Z_B = -Z_E^T. \quad (5.16)$$

Korollar 5.5: Die Matrix S aus (5.15) mit (5.16) hat rein imaginäre Eigenwerte.

Beweis: Wir wenden wieder Satz 5.2 an. Die Matrix Ω^2 ist symmetrisch und

positiv semidefinit. Die Matrizen X und Y aus Satz 5.2 sind durch

$$X = \begin{bmatrix} 0 & Z_E & -Y_E \\ -Z_E & 0 & X_E \\ Y_E & -X_E & 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad Y = \begin{bmatrix} 0 & Z_B^T & -Y_B^T \\ -Z_B^T & 0 & X_B^T \\ Y_B^T & -X_B^T & 0 \end{bmatrix}$$

gegeben. Mit (5.16) folgt $X = -Y$ und damit die Behauptung. \square

5.5 Numerische Dispersionsrelation

In diesem Abschnitt wird die numerische Dispersionsrelation des eindimensionalen Schemas (5.7) hergeleitet. Wir setzen $\omega_p = \text{const}$, d.h. $\gamma_h = 1$ und definieren $\phi := \phi_E(\tau\omega_p)$, $\psi := \psi_E(\tau\omega_p)$ sowie $h := h_x$. Mit $E := E_y$, $p := p_y$ und $B := B_z$ ist ein gesamter Zeitschritt dann durch

$$p_j^{n+1} = \cos \tau\omega_p p_j^n + \frac{\sin \tau\omega_p}{\omega_p} \left(E_j^n - \frac{\tau}{2h} \psi \left(B_{j+\frac{1}{2}}^n - B_{j-\frac{1}{2}}^n \right) \right) \quad (5.17a)$$

$$\begin{aligned} E_j^{n+1} &= -\omega_p \sin \tau\omega_p p_j^n + \cos \tau\omega_p \left(E_j^n - \frac{\tau}{2h} \psi \left(B_{j+\frac{1}{2}}^n - B_{j-\frac{1}{2}}^n \right) \right) \\ &\quad - \frac{\tau}{2h} \psi \left(B_{j+\frac{1}{2}}^n - B_{j-\frac{1}{2}}^n \right) \end{aligned} \quad (5.17b)$$

$$B_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = B_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h} \phi \left(E_{j+1}^n - E_j^n + E_{j+1}^{n+1} - E_j^{n+1} \right) \quad (5.17c)$$

gegeben. Durch Einsetzen der ebenen Wellen

$$\begin{aligned} E_j^n &= E_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)}, \\ B_j^n &= B_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)}, \\ p_j^n &= p_0 e^{i(\omega n \tau - k j h)} \end{aligned}$$

und mit

$$B_{j+\frac{1}{2}}^n - B_{j-\frac{1}{2}}^n = B_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - B_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{2h} \phi \left(E_{j+1}^n - 2E_j^n + E_{j-1}^n \right)$$

erhalten wir

$$p_0(e^{i\omega\tau} - \cos \tau\omega_p) = \frac{\sin \tau\omega_p}{\omega_p} \left(E_0 \left(1 + \frac{\tau^2}{4h^2} \phi\psi (e^{-ikh} - 2 + e^{ikh}) \right) - B_0 \frac{\tau}{2h} \psi e^{-i\frac{\omega\tau}{2}} \left(e^{-i\frac{kh}{2}} - e^{i\frac{kh}{2}} \right) \right) \quad (5.18a)$$

$$p_0\omega_p \sin \tau\omega_p = E_0 \left(\cos \tau\omega_p - e^{i\omega\tau} + (\cos \tau\omega_p + 1) \frac{\tau^2}{4h^2} \phi\psi (e^{-ikh} - 2 + e^{ikh}) \right) - B_0 (\cos \tau\omega_p + 1) \frac{\tau}{2h} \psi e^{-i\frac{\omega\tau}{2}} \left(e^{-i\frac{kh}{2}} - e^{i\frac{kh}{2}} \right) \quad (5.18b)$$

$$B_0 (e^{i\frac{\omega\tau}{2}} - e^{-i\frac{\omega\tau}{2}}) e^{-i\frac{kh}{2}} = -E_0 \frac{\tau}{2h} \phi (e^{-ikh} - 1 + e^{i\omega\tau} (e^{-ikh} - 1)). \quad (5.18c)$$

Löst man (5.18b) nach p_0 , (5.18c) nach B_0 auf und setzt dies in (5.18a) ein ergibt sich

$$\begin{aligned} & (e^{i\omega\tau} - \cos \tau\omega_p) \left((\cos \tau\omega_p - e^{i\omega\tau}) (e^{i\omega\tau} - 1) \right. \\ & \quad \left. + (\cos \tau\omega_p + 1) \frac{\tau^2}{4h^2} \phi\psi ((e^{-ikh} - 2 + e^{ikh}) (e^{i\omega\tau} - 1) \right. \\ & \quad \left. + \left(e^{-i\frac{kh}{2}} - e^{i\frac{kh}{2}} \right)^2 (1 + e^{i\omega\tau}) \right) \\ & = \sin^2 \omega_p \tau \left(e^{i\omega\tau} - 1 + \frac{\tau^2}{4h^2} \phi\psi \left((e^{-ikh} - 2 + e^{ikh}) (e^{i\omega\tau} - 1) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \left(e^{-i\frac{kh}{2}} - e^{i\frac{kh}{2}} \right)^2 (1 + e^{i\omega\tau}) \right) \right). \end{aligned}$$

Definiert man nun $\epsilon := e^{i\omega\tau}$ erhält man ein Polynom dritten Grades in ϵ

$$-\epsilon^3 + \alpha\epsilon^2 - \alpha\epsilon + 1 = 0,$$

wobei

$$\alpha = 2 \cos \tau\omega_p + 1 - 2(\cos \tau\omega_p + 1) \frac{\tau^2 k^2}{4} \phi\psi \operatorname{sinc}^2 \frac{kh}{2}.$$

Die Nullstellen sind durch

$$\epsilon_1 = 1, \quad \epsilon_{2,3} = \frac{\alpha - 1 \pm \sqrt{(\alpha - 1)^2 - 4}}{2}$$

gegeben. Die Identität

$$\begin{aligned}
(\alpha - 1)^2 &= \left(\cos \tau \omega_p \left(2 - 2 \frac{\tau^2}{h^2} \phi \psi \sin^2 \frac{kh}{2} \right) - 2 \frac{\tau^2}{h^2} \phi \psi \sin^2 \frac{kh}{2} \right)^2 \\
&= \left(\cos \tau \omega_p \left(2 - 2 \frac{\tau^2}{h^2} \phi \psi \left(\frac{kh}{2} \operatorname{sinc} \frac{kh}{2} \right)^2 \right) - 2 \frac{\tau^2}{h^2} \phi \psi \left(\frac{kh}{2} \operatorname{sinc} \frac{kh}{2} \right)^2 \right)^2 \\
&= \left(\cos \tau \omega_p \left(2 - \frac{\tau^2 k^2}{2} \phi \psi \operatorname{sinc}^2 \frac{kh}{2} \right) - \frac{\tau^2 k^2}{2} \phi \psi \operatorname{sinc}^2 \frac{kh}{2} \right)^2
\end{aligned}$$

zeigt, dass der Imaginärteil von ϵ_2 und ϵ_3 genau dann ungleich Null ist, wenn

$$\frac{\tau^2 k^2}{2} \phi(\tau \omega_p) \psi(\tau \omega_p) \operatorname{sinc}^2 \frac{kh}{2} \leq 2 \quad (5.19)$$

gilt. In diesem Fall haben wir konjugiert komplexe Nullstellen, also $\epsilon_2 = \bar{\epsilon}_3$. Mit dem Satz von Vieta folgt $\epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3 = 1$ und da $\epsilon_1 = 1$ folgt daher $|\epsilon_2| = |\epsilon_3| = 1$. Aus (5.19) folgt also, dass alle Nullstellen genau dann Betrag 1 haben, wenn

$$\tau \sqrt{|\phi_E(\tau \omega_p) \psi_E(\tau \omega_p)|} \left| \sin \frac{kh}{2} \right| \leq h.$$

gilt und das Schema ist stabil.

Weiterhin gilt $\epsilon_2 + \epsilon_3 = \alpha - 1$, woraus im Falle konjugiert komplexer Nullstellen

$$e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau} = \alpha - 1,$$

folgt und damit

$$\omega = \frac{1}{\tau} \arccos \left(\cos \tau \omega_p - (\cos \tau \omega_p + 1) \frac{\tau^2 k^2}{4} \phi_E(\omega_p \tau) \psi_E(\omega_p \tau) \operatorname{sinc}^2 \frac{kh}{2} \right). \quad (5.20)$$

Abbildung 5.10 zeigt Real- und Imaginärteil von $k(\omega)$ für $\omega_p^2 = 1000$, $\tau = 0.5$, $h = 1$ und $\omega \in [0, \frac{\pi}{2\tau}]$.

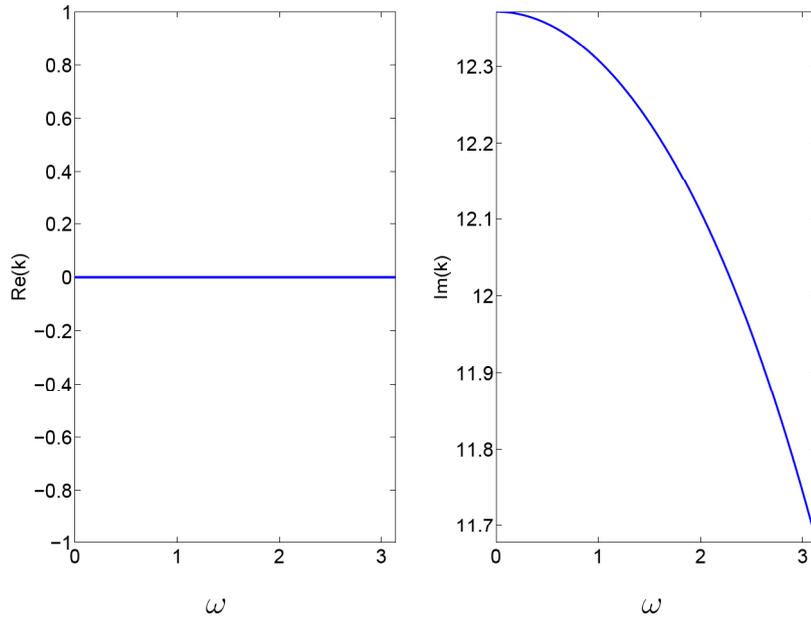


Abbildung 5.10: Plot des Real- und Imaginärteils von $k(\omega)$ mit $\omega_p^2 = 1000$, $\tau = 0.5$, $h = 1$ und $\omega \in [0, \frac{\pi}{2\tau}]$.

5.6 Energieerhaltung über lange Zeiten

Ein wichtiger Aspekt bei der Konstruktion von numerischen Verfahren ist die Energieerhaltung über lange Simulationszeiten. In diesem Abschnitt betrachten wir diese für das in diesem Kapitel vorgestellte Verfahren in 1D. Zum einen für das symmetrische Schema, d.h. $\gamma_h = 1$ und zum anderen im nicht-linearen und nichtsymmetrischen Fall $\gamma_h = \sqrt{1 + (p_h^2)/(m_h c)^2}$. Symmetrie ist eine wichtige Eigenschaft von Verfahren, um Energien über lange Zeiten zu erhalten [13, Kapitel 13].

Abbildung 5.11 zeigt den Energiefehler als Funktion der Simulationszeit. Einmal für das symmetrische und einmal für das nichtsymmetrische bzw. nicht-lineare Schema. Bei beiden Simulationen beträgt die Amplitude des als Anfangsbedingung initialisierten Laserspulses $a_0 = 0.05$, das Zentrum liegt bei $x_c = 50$ und die Länge beträgt $l = 10$. Das Simulationsgebiet ist das Intervall $[0, 200]$ mit einer Gitterweite von $h_x = 0.25$. Die Plasmaschicht, mit Plasmasdichte $\rho_h = 1$, ist auf dem Intervall $[100, 150]$ definiert. Das Zeitintervall ist

$[0, 20000]$ für $\tau = h_x$, d.h. es werden 80000 Zeitschritte gemacht. Die Energie in dimensionslosen Variablen wird durch

$$E_{tot} \approx \sum_{j=0}^{J-1} (\rho_h)_j (\gamma_h)_j + \sqrt{h_x} (\|E_y\|^2 + \|B_z\|^2)$$

approximiert, vergleiche (3.27). Der Betrag des relativen Fehlers in der Energie ist nach jedem Zeitschritt aufgetragen.

Bei dem symmetrischen Schema erkennt man leichte Schwankungen in der Energie, welche auftreten, wenn der Laserpuls vom Plasma oder dem Rand des Gebietes reflektiert wird. Hierbei findet ein Energieaustausch statt, welchen man in Abbildung 5.13 in Abschnitt 5.7 erkennt. Solange der Laserpuls sich im Vakuum bewegt, bleibt die Energie konstant. Insgesamt zeigt die Abbildung, dass kein Drift in der Energie entsteht und der Fehler über lange Zeiten nahezu konstant in der Größenordnung von 10^{-4} bleibt. Im nichtsymmetrischen Fall entsteht, wie zu erwarten, ein Drift in der Energie. Dieser ist allerdings sehr schwach und linear. Die Steigung der Geraden beträgt weniger als 0.2 und nach 80.000 Schritten bleibt der Fehler in der Größenordnung von 10^{-5} .

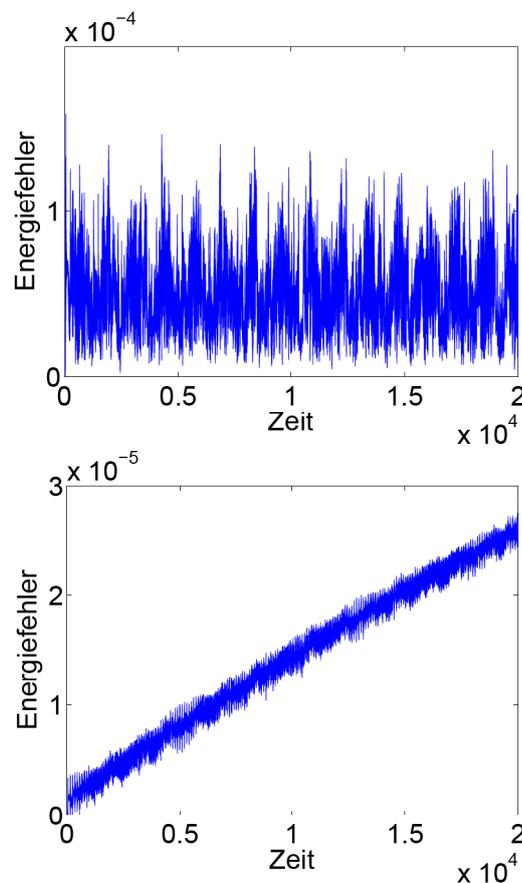


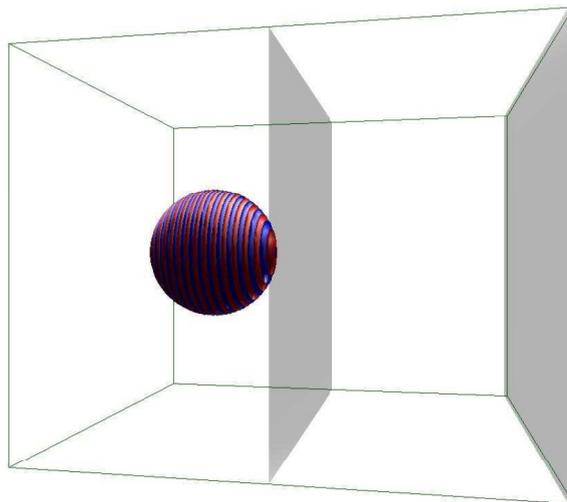
Abbildung 5.11: Plot des Energiefehlers über die Simulationszeit.

5.7 Physikalische Anwendungen – 3D Simulationen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse des in C++ implementierten und parallelisierten 3D Code H-VLPL aus [40] vorgestellt. Der Code wird an einigen physikalisch relevanten Anwendungen auf Genauigkeit und Einsatzfähigkeit getestet. Zunächst testen wir, ob die Ausbreitung durch ein Plasma niedriger Dichte sowie die Reflektion an einem hochdichten Plasma korrekt simuliert werden. Anschließend wird die Energieerhaltung des Verfahrens überprüft und dann der TNSA-Prozess simuliert. Abschließend werden die Dämpfung einer Welle in hochdichten Plasmen überprüft und Weibel-Instabilitäten untersucht.

5.7.1 Reflektion und Brechung des Laserpulses

Wie in Abschnitt 3.3 testen wir zunächst ob das Verfahren die Ausbreitung durch ein Plasma niedriger Dichte und die Reflektion an einem hochdichten Plasma korrekt simuliert. Wir wählen einen $26fs$ Gaußpuls mit Wellenlänge $0.8\mu m$ und eine Plasmaschicht mit Dichte $0.85\rho_c$. Die obere Grafik in Abbildung 5.12 zeigt den Laserpuls kurz bevor er die Plasmaschicht trifft, die untere wie er durch das Plasma propagiert. Bei der gleichen Simulation mit einer Dichte von $1.2\rho_c$ wird der Laserpuls vollständig reflektiert. Diese Simulationen wurden nur mit hydrodynamischen Teilchen, ohne kinetisch behandelte PIC-Teilchen, durchgeführt und die Effekte wurden korrekt dargestellt.



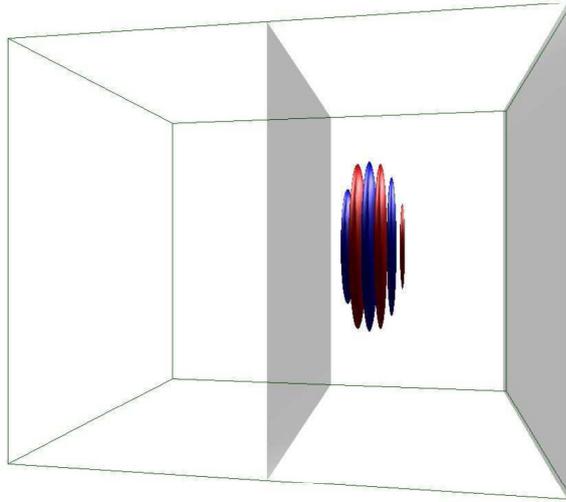


Abbildung 5.12: Ausschnitte der Simulation mit einem Plasma niedriger Dichte. Das obere Bild zeigt den Laserpuls kurz bevor er das Plasma trifft, das untere, wie er durch das Plasma propagiert.

5.7.2 Energieerhaltung

Eine weitere wichtige Eigenschaft ist, dass das Verfahren die Gesamtenergie des Systems (3.27) näherungsweise erhält. Abbildung 5.13 zeigt die Gesamtenergie über die Zeit, gemessen in Laserperioden, bei einer Simulation mit einem hochdichten Plasma. Während sich der Laserpuls im Vakuum bewegt, bleibt die Energie bis auf Änderungen in Größenordnung der Maschinengenauigkeit konstant. Zur Zeit $t_n = 45$ trifft der Laserpuls auf das Plasma und wird reflektiert. Dabei treten Schwankungen von 0.04% in der Gesamtenergie auf. Die Energie der hydrodynamischen Teilchen und der Felder oszilliert während der Reflektion. Der Laserpuls gibt Energie an das Plasma ab und die Schwankungen heben sich gegenseitig auf. Nachdem der Laserpuls vollständig reflektiert wurde, erreicht die Energie wieder dieselbe Konstante wie zuvor.

5.7.3 TNSA

Wie in Abschnitt 3.3.3 testen wir auch in 3D den TNSA-Prozess. Wir fokussieren einen 10fs Laserpuls mit Amplitude $a_0 = 2$ auf eine dünne Folie. Die Folie hat eine Dichte von $1000\rho_c$, ein durch den Laser erzeugtes Vorplasma an der vorderen Oberfläche und eine 80nm dicke Protonenschicht auf der Rück-

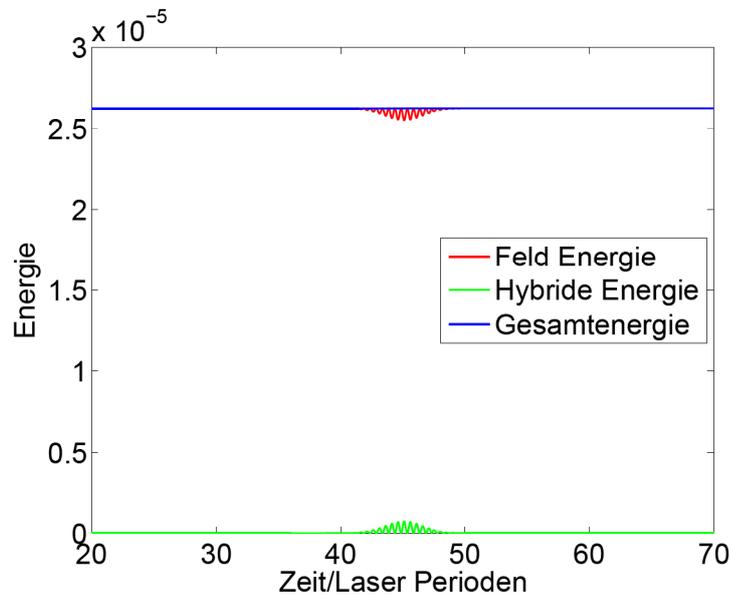


Abbildung 5.13: Gesamtenergie, Energie der Felder und Energie der hydrodynamischen Teilchen geplottet über die Zeit in Laserperioden.

seite. Das Vorplasma ist durch eine von 0 bis $2\rho_c$ ansteigende Dichterampe modelliert und wird mittels des PIC-Codes behandelt. Für die Protonen auf der Rückseite werden ebenfalls PIC-Teilchen verwendet. Der hochdichte Teil wird mit dem hydrodynamischen Algorithmus behandelt. Der starke Laser erzeugt eine Wolke heißer Elektronen, welche durch die Folie propagiert. Sobald die Elektronen die Oberfläche verlassen, entsteht ein starkes elektrostatisches Feld, die Protonen werden aus der Folie herausgedrückt und auf hohe Energien beschleunigt. Abbildung 5.14 zeigt wie der Laser auf das Plasma trifft, jeder Punkt stellt ein Makroteilchen dar. Abbildung 5.15 zeigt das Verhalten der Teilchen nachdem der Laser reflektiert wurde und eine Schicht von Protonen sich begonnen hat zu lösen.

Abbildung 5.16 zeigt das Spektrum der beschleunigten Ionen. Es werden Energien von bis zu 0.9 MeV erreicht, was im Vergleich zu der Intensität des Lasers sehr bemerkenswert ist.

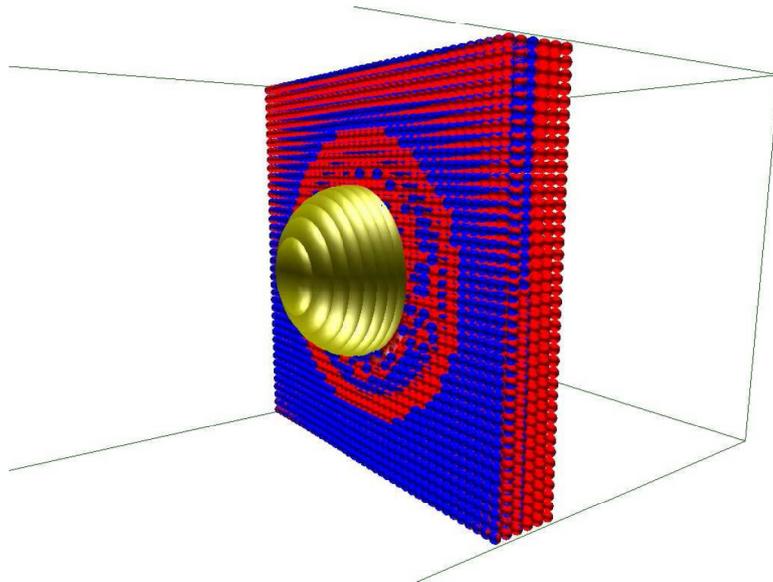


Abbildung 5.14: Ausschnitt der TNSA-Simulation nach 10 Laserperioden, wenn der Laser auf das Plasma trifft. PIC-Makroteilchen, die Elektronen enthalten, sind blau dargestellt, die roten enthalten Protonen.

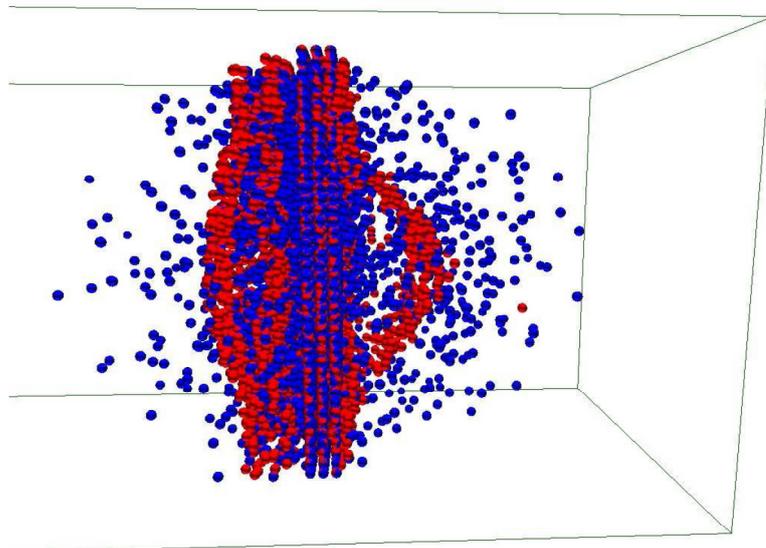


Abbildung 5.15: Ausschnitt der TNSA-Simulation nach 380 Laserperioden, nachdem der Laser reflektiert wurde und sich die roten Protonen begonnen haben zu lösen.

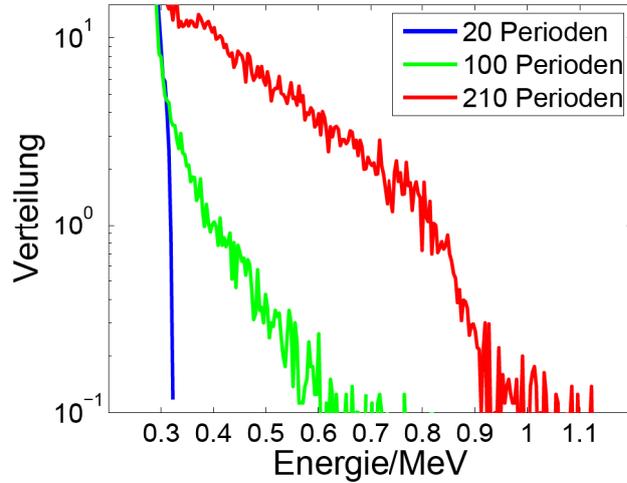


Abbildung 5.16: Spektrum der beschleunigten Ionen aus der TNSA Simulation.

5.7.4 Dämpfung in hochdichten Plasmen

In diesem Abschnitt wird wieder die Dämpfung eines Laserpulses an einem hochdichten Plasma getestet. Entsprechend der Theorie gilt im Plasma $E(x) \sim \exp(-x/\delta_s)$ [19, Kapitel 5], mit der Skinlänge δ_s . Mehrere Simulationen mit Dichten von $1.5\rho_c$ bis $500\rho_c$ wurden, unter Verwendung eines Laserpulses mit einer Dauer von $16fs$ und einer Amplitude von $a_0 = 0.01$, um relativistische Nichtlinearitäten zu vermeiden, durchgeführt. Abbildung 5.17 zeigt einen logarithmischen Plot des \mathbf{E} -Feldes und dem theoretisch erwartetem Ergebnis für drei unterschiedliche Dichten und man sieht eine sehr gute Übereinstimmung. Abbildung 5.18 zeigt die Skinlänge als Funktion der Dichte und auch hier stimmen die während der Simulationen gemessenen Werte sehr gut mit der Theorie überein. Die Gitterweite in diesen Simulationen wurde als 0.05λ gewählt und selbst wenn die Skinlänge wesentlich kleiner wird, erhalten wir bis zu einer Dichte von $500\rho_c$, wobei dann $\delta_s = 0.007\lambda$, sehr gute Ergebnisse.

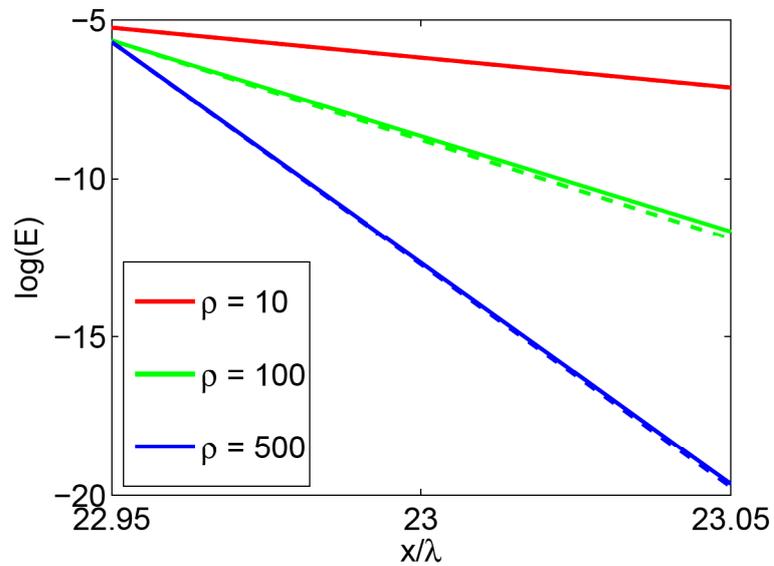


Abbildung 5.17: Logarithmischer Plot des \mathbf{E} -Feldes für drei unterschiedliche Dichten. Die durchgezogenen Linien zeigen die Simulationsergebnisse und die gestrichelten die Theorie.

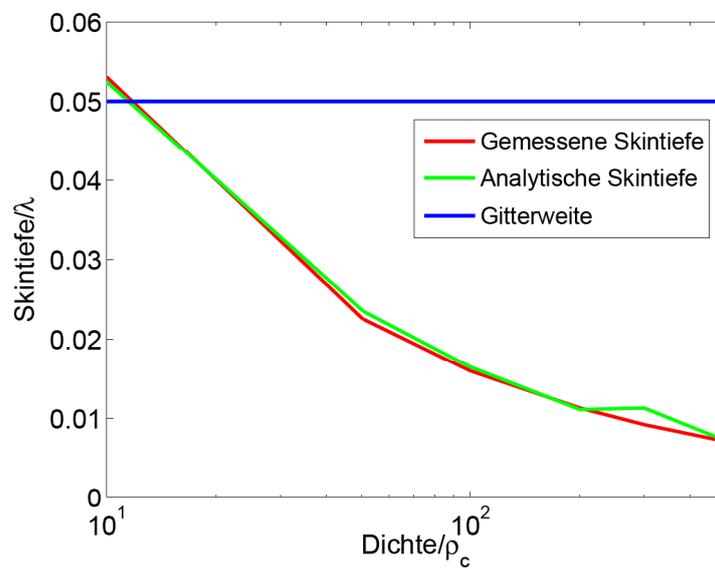


Abbildung 5.18: Plot der Skintiefe über die Dichte. Die blaue Linie zeigt die Gitterweite.

5.7.5 Weibel-Instabilitäten

Untersucht man das Fast Ignition-Konzept (FI) der Trägheitsfusion (Inertial Confinement Fusion (ICF)) [37] so interessiert man sich insbesondere für das Verhalten von Elektronenstrahlen die durch ein Plasma propagieren. Ein zentraler Punkt ist hierbei, wieviel Energie durch den Strahl in das Plasma abgegeben wird und wie er sich zeitlich verändert. Ein bedeutendes technisches Problem besteht dabei in der sogenannten Weibel-Instabilität [43], welche zu einer transversalen Filamentierung des Strahls führt. Sie ist daher ein wichtiges Phänomen, welches bereits intensiv durch PIC-Simulationen untersucht wurde [18, 21, 25], was für niedrige Dichten bis etwa $100\rho_b$, wobei ρ_b die Dichte des Elektronenstrahls bezeichnet, durchaus sinnvoll ist. Allerdings treten in FI-Experimenten, wenn sich der Strahl dem Pelletkern nähert, weitaus höhere Dichten auf, welche sich aus Stabilitätsgründen nicht in angemessener Zeit kinetisch simulieren lassen. Der Code H-VLPL ermöglicht dies.

Wir untersuchen das Phänomen der Weibel-Instabilität indem wir für den Elektronenstrahl PIC-Teilchen verwenden und das Plasma hydrodynamisch behandeln. Um zu zeigen, dass die Simulationsergebnisse des H-VLPL Codes physikalisch korrekt sind, simulieren wir die gleiche Situation sowohl mit dem klassischen PIC-Modell als auch mit H-VLPL. Wir wählen einen Elektronenstrahl mit Dichte ρ_b , welcher durch ein Plasma mit Dichte $\rho_p = 100\rho_b$ propagiert. Der Elektronenstrahl hat den Impuls $p_b = mc$ mit einer thermischen Breite von $10^{-4}mc$. Der Impuls des Plasmas ist so gewählt, dass

$$\rho_b v_b + \rho_p v_p = 0$$

gilt.

Die Simulation ist auf zwei Raumdimensionen beschränkt, was notwendig ist, um Zweistrominstabilitäten auszuschließen. Der Elektronenstrahl bewegt sich rechtwinklig zur x - y -Ebene. Nach ca. 3.3 Plasmaperioden $2\pi/\omega_b$, wobei $\omega_b = \sqrt{4\pi\rho_b e^2/m}$, beobachtet man eine starke Filamentierung des Strahls und ein magnetisches Feld entsteht. Ein Vergleich der Ergebnisse der beiden Simulationen zeigt, dass H-VLPL die Effekte sehr gut darstellt, siehe Abbildung 5.19. Vergleicht man das Integral über das quadrierte magnetische Feld

$$\int_V \mathbf{B}^2 dV$$

der beiden Modelle, Abbildung 5.20, sieht man ebenfalls ein sehr ähnliches Verhalten. Allerdings beschreibt H-VLPL die Filamentierung während der nicht-linearen Phase nicht exakt, da nicht alle physikalisch relevanten Effekte mit einbezogen sind. Weiterhin reagiert das hydrodynamisch behandelte Plasma nicht sofort auf die magnetischen Felder. Trotzdem gibt H-VLPL das Verhalten der Weibel-Instabilität präzise wieder.

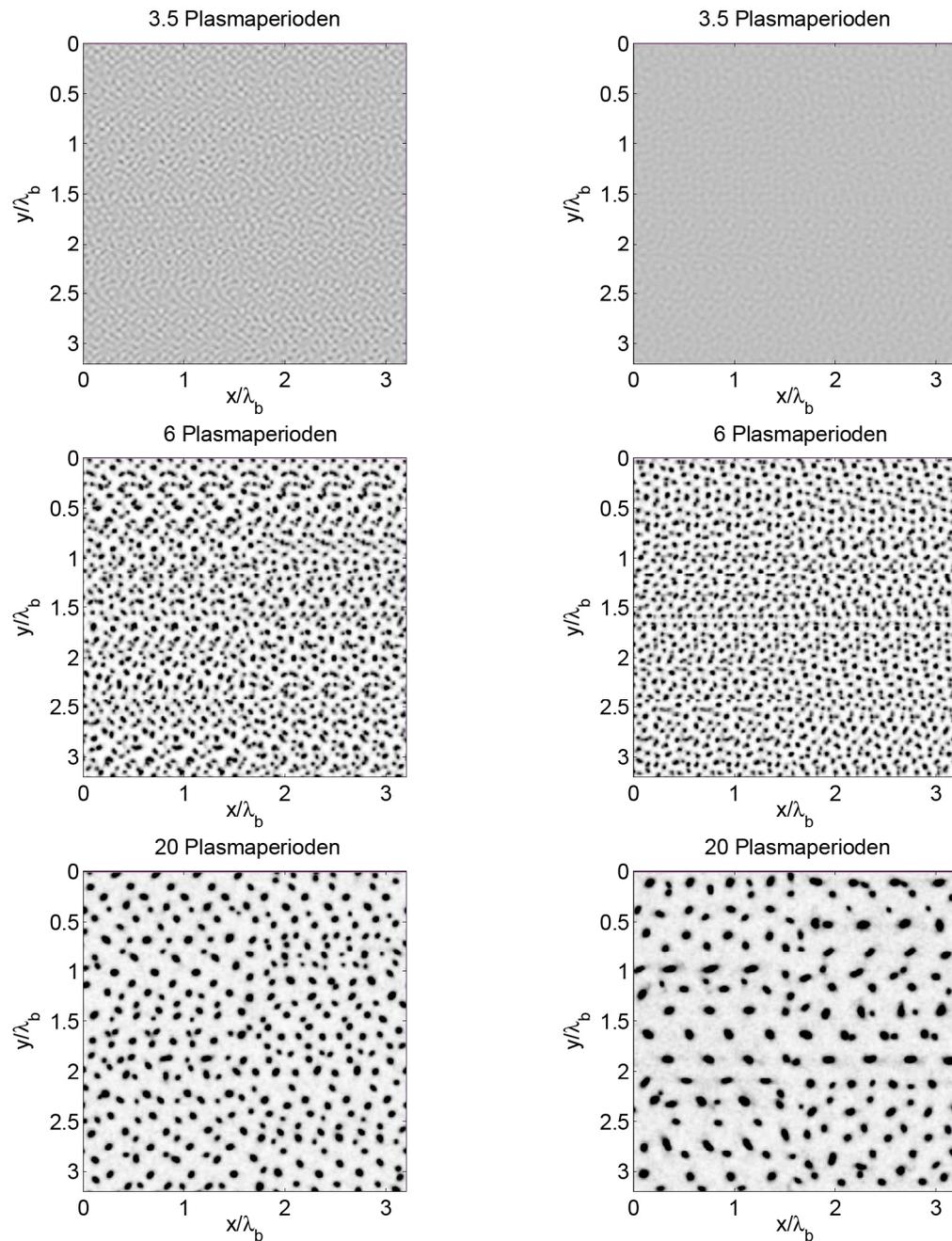


Abbildung 5.19: Ausschnitte der Simulation der Weibel-Instabilität. PIC (links) und H-VLPL (rechts) zu den Zeiten 3.5, 6, und 20 gemessen in Plasmaperioden des Strahls. Dargestellt ist die Dichte ρ_b in der x - y -Ebene. Dunkle Bereiche kennzeichnen hohe Dichten. Man erkennt ein sehr ähnliches Verhalten, obgleich die Instabilität bei der hybriden Simulation ungefähr 0.5 Strahlperioden später einsetzt.

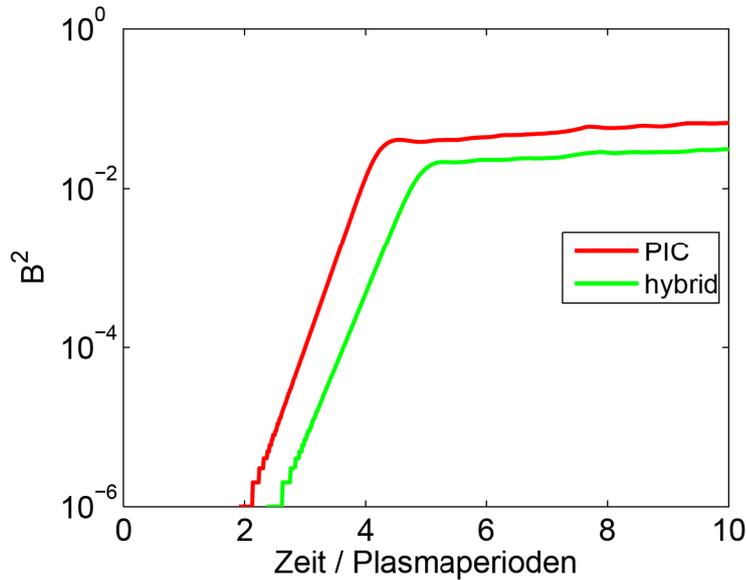


Abbildung 5.20: Integral des quadrierten magnetischen \mathbf{B} -Feldes geplottet über die Zeit in Plasmaperioden.

5.8 Fazit

Die Vergleiche mit dem 3D Code VLPL und theoretischen Resultaten aus dem vorigen Abschnitt zeigen, dass sich der neu entwickelte 3D Code H-VLPL sehr gut eignet, um physikalische Anwendungen zu simulieren. Das Verhalten der Weibel-Instabilität wird beispielsweise sehr gut dargestellt und da der Rechenaufwand ohne das hybride Modell für sehr hohe Dichten enorm hoch ist, bietet H-VLPL hier eine sehr gute Alternative, um relevante Dichtebereiche zu simulieren.

Um Stabilität von VLPL zu garantieren, muss $\tau \leq 2/\omega_p$ gelten. Wegen $\omega_p = \sqrt{4\pi\rho e^2/m}$ benötigt VLPL also $\sim \sqrt{\rho/\rho_c}$ -mal mehr Zeitschritte als H-VLPL. Allerdings führt eine große Abweichung der Zeitschrittweite von der Ortschaftweite zu numerischer Dispersion, also muss die Ortschaftweite auch angepasst werden um gute Resultate zu erhalten. Dann benötigt VLPL $\sim (\rho/\rho_c)^2$ -mal mehr Rechenzeit. Abbildung 5.21 zeigt grafisch die enorme Ersparnis an Rechenzeit bei ansteigender Dichte. Startet man also eine Simulation mit einer Dichte von $1000\rho_c$ für die H-VLPL beispielsweise 10 Minuten benötigt mit VLPL und passt Zeit- und Ortschaftweite entsprechend an, müsste man ca. 694 Tage auf das Ergebnis warten.

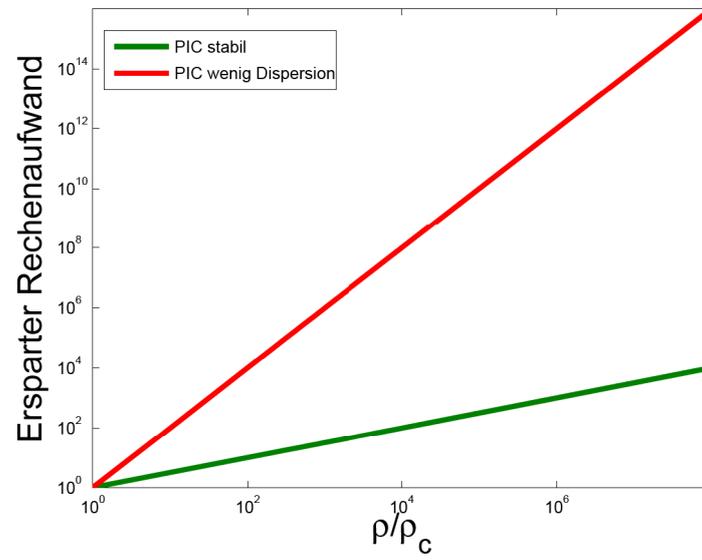


Abbildung 5.21: Ersparnis an Rechenzeit bei ansteigender Dichte.

Literatur

- [1] J. Biesiadecki and R. Skeel. Dangers of multiple time step methods. *Journal of Computational Physics*, 109:318–328, 1993.
- [2] C. K. Birdsall and A. B. Langdon. *Plasma Physics Via Computer Simulation*. Adam Higer, 1991.
- [3] S. Braginskii. Transport processes in a plasma. *Reviews of plasma physics*, 1:205, 1965.
- [4] W. Chew and W. Weedon. A 3-D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates. *Microwave and Optical Technology Letters*, 7(13):599–604, 1994.
- [5] J. Davies, A. Bell, M. Haines, and S. Guerin. Short-pulse high-intensity laser-generated fast electron transport into thick solid targets. *Physical Review E*, 56(6):7193–7203, 1997.
- [6] R. Fonseca, L. Silva, F. Tsung, V. Decyk, W. Lu, C. Ren, W. Mori, S. Deng, S. Lee, T. Katsouleas, et al. OSIRIS: a three-dimensional, fully relativistic particle in cell code for modeling plasma based accelerators. *Lecture Notes in Computer Science*, pages 342–351, 2002.
- [7] B. García-Archilla, J. Sanz-Serna, and R. Skeel. Long-Time-Step Methods for Oscillatory Differential Equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20(3):930–963, 1999.
- [8] W. Gautschi. Numerical integration of ordinary differential equations based on trigonometric polynomials. *Numerische Mathematik*, 3(1):381–397, 1961.
- [9] L. Gremillet, G. Bonnaud, and F. Amiranoff. Filamented transport of laser-generated relativistic electrons penetrating a solid target. *Physics of Plasmas*, 9:941, 2002.
- [10] V. Grimm and M. Hochbruck. Error analysis of exponential integrators for oscillatory second-order differential equations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39:5495, 2006.
- [11] H. Grubmüller, H. Heller, A. Windemuth, and K. Schulten. Generalized Verlet algorithm for efficient molecular dynamics simulations with long-range interactions. *Molecular Simulation*, 6(1):121–142, 1991.

-
- [12] T. Hagstrom, O. Bruno, A. Buffa, R. Hiptmair, M. Costabel, M. Dauge, L. Demkowicz, P. Joly, B. Fornberg, T. Ha-Duong, et al. New results on absorbing layers and radiation boundary conditions. *Topics in Computational Wave Propagation: Direct and Inverse Problems*, pages 1–39, 2003.
- [13] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric numerical integration*. Springer Berlin, 2002.
- [14] B. Hegelich, B. Albright, J. Cobble, K. Flippo, S. Letzring, M. Paf-fett, H. Ruhl, J. Schreiber, R. Schulze, and J. Fernandez. Laser acceleration of quasi-monoenergetic MeV ion beams. *NATURE-LONDON-*, 439(7075):441, 2006.
- [15] B. Hegelich, S. Karsch, G. Pretzler, D. Habs, K. Witte, W. Guenther, M. Allen, A. Blazevic, J. Fuchs, J. Gauthier, et al. MeV ion jets from short-pulse-laser interaction with thin foils. *Physical review letters*, 89(8):85002, 2002.
- [16] M. Hochbruck and C. Lubich. A Gautschi-type method for oscillatory second-order differential equations. *Numerische Mathematik*, 83(3):403–426, 1999.
- [17] M. Hochbruck and A. Ostermann. Exponential integrators. *Acta Numerica*, 2010, erscheint.
- [18] M. Honda, J. Meyer-ter Vehn, and A. Pukhov. Collective stopping and ion heating in relativistic-electron-beam transport for fast ignition. *Physical Review Letters*, 85(10):2128–2131, 2000.
- [19] J. Jackson and R. Fox. Classical electrodynamics. *American Journal of Physics*, 67:841, 1999.
- [20] M. Kaluza, J. Schreiber, M. Santala, G. Tsakiris, K. Eidmann, J. Meyer-ter Vehn, and K. Witte. Influence of the laser prepulse on proton acceleration in thin-foil experiments. *Physical review letters*, 93(4):45003, 2004.
- [21] A. Karmakar, N. Kumar, A. Pukhov, O. Polomarov, and G. Shvets. Detailed particle-in-cell simulations on the transport of a relativistic electron beam in plasmas. *Physical Review E*, 80(1):16401, 2009.
- [22] N. Krall, A. Trivelpiece, and R. Gross. Principles of plasma physics. *American Journal of Physics*, 41:1380, 1973.

- [23] W. Kruer. *The physics of laser plasma interactions*. Westview Pr, 2003.
- [24] N. Kumar and A. Pukhov. New class of self-similar solutions for vacuum plasma expansion admitting mono-energetic ion spectra. *Arxiv preprint arXiv:0710.3019*, 2007.
- [25] R. Lee and M. Lampe. Electromagnetic instabilities, filamentation, and focusing of relativistic electron beams. *Physical Review Letters*, 31(23):1390–1393, 1973.
- [26] J. Liljo, A. Karmakar, A. Pukhov, and M. Hochbruck. One-dimensional electromagnetic relativistic PIC-hydrodynamic hybrid simulation code H-VLPL (hybrid virtual laser plasma lab). *Computer Physics Communications*, 179(6):371–379, 2008.
- [27] R. Mason. Monte Carlo hybrid modeling of electron transport in laser produced plasmas. *Physics of Fluids*, 23:2204, 1980.
- [28] C. Nieter and J. Cary. VORPAL: a versatile plasma simulation code. *Journal of Computational Physics*, 196(2):448–473, 2004.
- [29] A. Pukhov. Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab). *Journal of Plasma Physics*, 61(03):425–433, 1999.
- [30] A. Pukhov. Three-Dimensional Particle-in-Cell Simulations of Relativistic Laser-Plasma Interactions. *Lecture Notes*, 1999.
- [31] A. Pukhov. Three-dimensional simulations of ion acceleration from a foil irradiated by a short-pulse laser. *Physical review letters*, 86(16):3562–3565, 2001.
- [32] P. Rambo and J. Denavit. Fluid and field algorithms for time-implicit plasma simulation. *Journal of Computational Physics*, 92(1):185–212, 1990.
- [33] P. Rambo and J. Denavit. Interpenetration and ion separation in colliding plasmas. *Physics of Plasmas*, 1:4050, 1994.
- [34] L. Robson, P. Simpson, R. Clarke, K. Ledingham, F. Lindau, O. Lundh, T. McCanny, P. Mora, D. Neely, C. Wahlström, et al. Scaling of proton acceleration driven by petawatt-laser-plasma interactions. *Nature Physics*, 3(1):58–62, 2006.

-
- [35] C. Stormer. Sur les trajectoires des corpuscules electriques dans l'espace sous l'action du magnetisme terrestre, Chapitre IV. *Arch. Sci. phys. et naturelles*, 24:317–364, 1907.
- [36] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, pages 506–517, 1968.
- [37] M. Tabak, J. Hammer, M. Glinsky, W. Kruer, S. Wilks, J. Woodworth, E. Campbell, M. Perry, and R. Mason. Ignition and high gain with ultra-powerful lasers. *Physics of Plasmas*, 1(5):1626, 1994.
- [38] H. Trotter. On the product of semi-groups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, pages 545–551, 1959.
- [39] M. Tuckerman, B. Berne, and G. Martyna. Reversible multiple time scale molecular dynamics. *The Journal of Chemical Physics*, 97(3):1990, 1992.
- [40] T. Tückmantel, J. Liljo, M. Hochbruck, and A. Pukhov. Three-dimensional relativistic particle-in-cell hybrid code based on an exponential integrator. 2010, eingereicht.
- [41] J. Verboncoeur, A. Langdon, and N. Gladd. An object-oriented electromagnetic PIC code. *Computer Physics Communications*, 87(1):199–211, 1995.
- [42] L. Verlet. Computer experiments on classical fluids. *Physical Review*, 159:98–103, 1967.
- [43] E. Weibel. Spontaneously growing transverse waves in a plasma due to an anisotropic velocity distribution. *Physical Review Letters*, 2(3):83–84, 1959.
- [44] D. Welch, D. Rose, R. Clark, T. Genoni, and T. Hughes. Implementation of a non-iterative implicit electromagnetic field solver for dense plasma simulation. *Computer Physics Communications*, 164(1-3):183–188, 2004.
- [45] S. Wilks, A. Langdon, T. Cowan, M. Roth, M. Singh, S. Hatchett, M. Key, D. Pennington, A. MacKinnon, and R. Snavely. Energetic proton generation in ultra-intense laser–solid interactions. *Physics of Plasmas*, 8:542, 2001.
- [46] K. Yee et al. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwells equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propagat*, 14(3):302–307, 1966.

- [47] F. Zheng and Z. Chen. Numerical dispersion analysis of the unconditionally stable 3-D ADI-FDTD method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 49(5):1006–1009, 2001.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich bei der Entstehung dieser Arbeit unterstützt haben.

Besonderer Dank gilt Prof. Dr. Marlis Hochbruck, die es mir ermöglicht hat diese Arbeit zu schreiben und jederzeit ein offenes Ohr hatte. Ohne ihre Anregungen, Erfahrungen und die Diskussionen mit ihr wäre diese Arbeit in dieser Form nicht entstanden.

Des Weiteren danke ich Prof. Dr. Alexander Pukhov für die gute Betreuung, die Einführung in den Code VLPL und die Unterstützung bei physikalischen Fragen.

Bei Dr. Volker Grimm bedanke ich mich für die hilfreichen Ratschläge und Gespräche. Auch allen weiteren ehemaligen und derzeitigen Mitarbeitern des Instituts danke ich für die angenehme gemeinsame Zeit, Zusammenarbeit und das Korrekturlesen meiner Arbeit.

Außerdem danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des Projektes B5 im Sonderforschungsbereich TR 18. Ich danke Dr. Anupam Karmakar und Tobias Tückmantel für die Zusammenarbeit in diesem Projekt und die Umsetzung der Verfahren in C++.

Besonderer Dank gilt natürlich auch meinen Eltern Ursula und Matti Liljo für die Unterstützung und den Rückhalt in allen Situationen meines Lebens.

Erklärung

Die hier vorgelegte Dissertation habe ich eigenständig und ohne unerlaubte Hilfsmittel angefertigt. Die Dissertation wurde in der vorgelegten oder ähnlicher Form noch bei keiner anderen Institution eingereicht. Ich habe bisher keine erfolglosen Promotionsversuche unternommen.

Düsseldorf, den 13.01.2010

Jalo Liljo