

## Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II

### Übungsblatt 1 - Lösung

#### 1) Größenordnungen

Da ein Mol Wasser eine Masse von  $18g$  hat, enthält  $1kg$  Wasser:

$$\frac{1000g}{18\frac{g}{mol}} = 55.56mol \approx 50mol$$

Die Avogadro Konstante (ca.  $6 \cdot 10^{23}$ ) gibt die Anzahl an Molekülen in einem Mol eines Stoffes an. Damit enthält der Maßkrug die folgende Anzahl an Molekülen:

$$50 \cdot 6 \cdot 10^{23} = 3 \cdot 10^{25}$$

Da wir so einen tollen Algorithmus haben, entspricht das genau der Anzahl an Operationen, die wir pro Zeitschritt benötigen. Unser Supercomputer kann nun  $10^{15}$  Operationen pro Sekunde ausführen. Damit benötigt ein Zeitschritt der Simulation:

$$\frac{3 \cdot 10^{25}}{10^{15}} s = 3 \cdot 10^{10} s$$

Da ein Jahr ungefähr  $3 \cdot 10^7$  Sekunden hat, benötigen wir also 1000 Jahre für einen einzigen Zeitschritt. Für die Simulation der ganzen Sekunde benötigen wir also

$$1000Jahre \cdot 10^{15} = 10^{18}Jahre$$

Zum Vergleich: Das Universum ist etwas mehr als 10 Milliarden ( $10^{10}$ ) Jahre alt, wir müssen also nur 100 Millionen Mal so lange warten wie unser Universum bislang existiert.

Nach dem Moorschen Gesetz verdoppelt sich die Rechenleistung ca. alle 18 Monate. Wenn wir die Simulation also beispielsweise drei Jahre später starten, läuft sie "nur" noch  $2.5 \cdot 10^{17}$  Jahre.

Wie man anhand der Tabelle sieht, lohnt es sich in 90 Jahren, mit der Rechnung zu beginnen. Sie ist dann innerhalb eines Jahres abgeschlossen.

Startjahr	Rechenzeit in Jahren
2011	$10^{18}$
2014	$2.5 \cdot 10^{17}$
2017	$6.25 \cdot 10^{16}$
...	...
2053	$9.31 \cdot 10^8$
...	...
2068	$9.31 \cdot 10^8$
2095	3.47
2098	0.87

## 2) Startkonfiguration

Für die folgenden Berechnungen werden  $\sigma$ ,  $\epsilon$  und die Masse von Argon verwendet:

$$\begin{aligned}\sigma &= 3.41 \cdot 10^{-10} m \\ \epsilon &= 119.8 \cdot 1.38066 \cdot 10^{-23} J \\ &= 1.654 \cdot 10^{-21} J\end{aligned}$$

Die molare Masse von Argon ist  $39.948 \frac{g}{mol} = 3.9948 \cdot 10^{-2} \frac{kg}{mol}$  und ein Mol Gas unter Normalbedingungen enthält  $6.0221415 \cdot 10^{23}$  Moleküle (Avogadro Konstante), daher folgt für die Masse eines Atoms:

$$\begin{aligned}m &= \frac{3.9948 \cdot 10^{-2}}{6.0221415 \cdot 10^{23}} kg \\ &= 6.6335 \cdot 10^{-26} kg\end{aligned}$$

Die Loschmidt Zahl entspricht der Anzahl an Molekülen in  $1 cm^3$  eines idealen Gases unter Normalbedingungen. Das Volumen des Simulationsgebiets ist  $(1 \mu m)^3 = 10^{-12} cm^3$ . Es folgt für die Anzahl  $N$  an Atomen im Simulationsgebiet:

$$N = 2.687 \cdot 10^{19} \frac{1}{cm^3} \cdot 10^{-12} cm^3 = 2.687 \cdot 10^7$$

Mit den Formeln für die dimensionslose Positiontion und Zeit erhalten wir

$$\begin{aligned}L^* &= \frac{1}{\sigma} \cdot L = \frac{1}{3.41 \cdot 10^{-10} m} \cdot 10^{-6} m \\ &= 2932.6 \\ dt^* &= \frac{1}{\sigma} \cdot \sqrt{\frac{\epsilon}{m}} \cdot dt = \frac{1}{3.41 \cdot 10^{-10} m} \cdot \sqrt{\frac{1.654 \cdot 10^{-21} J}{6.6335 \cdot 10^{-26} kg}} \cdot 2.17 \cdot 10^{-15} s \\ &= 0.001\end{aligned}$$

Bevor wir die dimensionslose Form der Geschwindigkeit berechnen können, müssen wir zunächst die "echte" Geschwindigkeit berechnen. Die Temperatur eines Stoffes ist definiert durch die kinetische Energie. Die kinetische Energie wiederum lässt sich aus der Masse und Geschwindigkeit der Atome berechnen:

$$T = \frac{2}{3 \cdot N \cdot k_B} \cdot E_{kin}$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot \sum_i m_i \cdot v_i^2$$

$$= \frac{1}{2} \cdot N \cdot m \cdot v^2$$

Diese Formeln lassen sich umformen zu:

$$E_{kin} = \frac{3}{2} \cdot N \cdot k_B \cdot T = \frac{3}{2} \cdot 2.687 \cdot 10^7 \cdot 1.38066 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K} \cdot 273.15 K$$

$$= 1.52 \cdot 10^{-13} J$$

$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot E_{kin}}{N \cdot m}}$$

$$= \sqrt{\frac{2 \cdot 1.52 \cdot 10^{-13} J}{2.687 \cdot 10^7 \cdot 6.6335 \cdot 10^{-26} kg}}$$

$$= 412.98 \frac{m}{s}$$

Daraus lässt sich nun die dimensionslose Form der Geschwindigkeit berechnen

$$v^* = \frac{dt}{\sigma} \cdot v = \frac{2.17 \cdot 10^{-15} s}{3.41 \cdot 10^{-10} m} \cdot 412.98 \frac{m}{s}$$

$$= 0.0026281$$

Der letzte zu berechnende Wert ist die Dimensionslose Form der Temperatur:

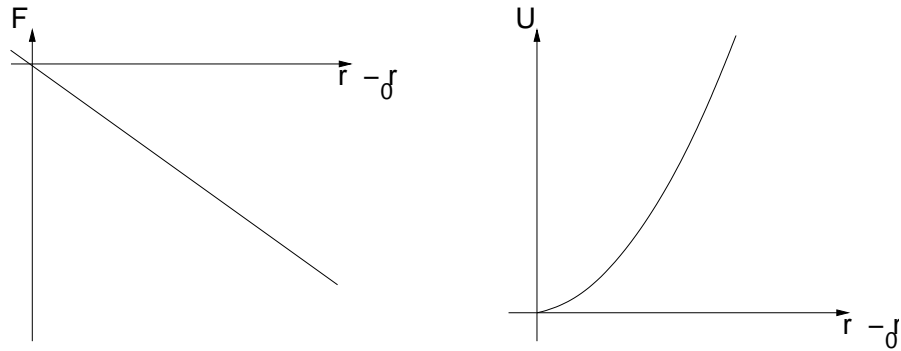
$$T^* = T \cdot \frac{k_B}{\epsilon} = 273.15 K \cdot \frac{1.38066 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}}{1.654 \cdot 10^{-21} J}$$

$$= 2.2801$$

### 3) Zwei-Körper Potentiale

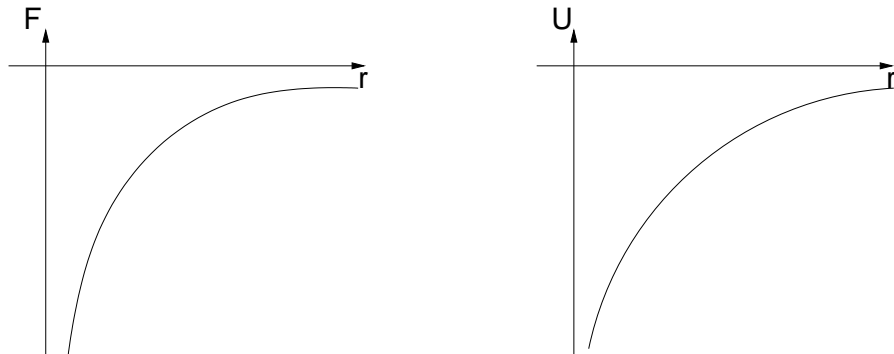
a) Potentielle Energie der Feder:

$$U_{\text{harm}}(r) = - \int F(r) dr = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2.$$



Gravitationspotential:

$$U_{\text{grav}}(r) = - \int F(r) dr = -g \frac{m_1 m_2}{r}.$$



b) In der Vorlesung wurden zwei Klassen von Potentialen unterschieden: “hard sphere” Potentiale und “soft sphere” Potentiale.

Der Grundgedanke der “hard sphere” Potentiale ist, dass die Atome sich schlagartig abstoßen, sobald sie sich “berühren”. Das Potential hat also eine Sprungstelle bei  $r = \sigma$ . Für kleinere  $r$  ist das Potential überhaupt nicht definiert, für größere  $r$  wurden drei Varianten besprochen. Beim normalen hard sphere Potential ist das Potential Null für  $r > \sigma$ . Damit ist die Kraft nur definiert für  $r > \sigma$  und ist im gesamten Definitionsbereich Null.

Das Square-well Potential ist auf einem kleinen Bereich (die Atome sind nah beieinander, berühren sich aber noch nicht) das Potential negativ. Damit soll eine Anziehungskraft bei geringem Abstand modelliert werden. Der Definitionsbereich für die Kraft ist gegenüber dem vorigen Potential weiter eingeschränkt (die zweite Sprungstelle). Auf dem verbleibenden Bereich ist sie weiterhin Null.

Das Sutherland Potential benutzt für die anziehende Kraft schon eine differenzierbare Funktion. Die Kraft ist für  $r > \sigma$  überall definiert und ungleich Null. Sie wird umso stärker, je näher die Atome sich kommen.

Wesentliches Element der Molekulardynamiksimulation ist die Berechnung der Kraft die die Partikel aufeinander ausüben. Bei allen bislang betrachteten Potentialen lässt sich diese Kraft nicht zuverlässig berechnen. Es wird ein Potential benötigt, das für alle positiven  $r$  definiert ist.

Diese Bedingung wird von den "soft sphere" Potentialen erfüllt. Das normale "soft sphere" Potential modelliert wie das "hard sphere" Potential die Abstoßung der Atome. Allerdings steigt das Potential nicht erst bei Berührung an, sondern schon ab einem gewissen Abstand. Die Kraft wird betragsmäßig umso stärker, je näher sich die Atome kommen.

Im Gegensatz dazu modelliert das van der Waals Potential die Anziehung zweier Atome. Die Kraft steigt ebenso mit abnehmendem Abstand an.

Das Lennard-Jones Potential ist die Kombination aus soft sphere und van der Waals Potential. Bewegen sich zwei Partikel aufeinander zu, wird die anziehende Kraft zunächst stärker (das abstoßende Potential ist extrem kurzreichweitig), dann wieder schwächer bis anziehende Kraft und abstoßende Kraft sich aufheben. Die resultierende Kraft ist damit Null. Wird der Abstand weiter verringert, dominiert die abstoßende Kraft.