

Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II

Musterlösung 2 - Diskretisierung

1) Hard-Sphere Modell 3D

- einfaches kubisches Gitter: Man stellt sich einen Würfel vor, auf dessen Ecken jeweils eine Kugel sitzt. Der Durchmesser jeder Kugel entspricht der Seitenlänge des Würfels. Es sind insgesamt acht Kugeln. Von jeder dieser Kugeln befindet sich genau ein Achtel des Volumens innerhalb des Würfels. Dies ist zusammen genau das Volumen einer Kugel. Diese hat das Volumen $\frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{\pi}{6}D^3$. Das Volumen des Würfels ist D^3 . Damit ist die relative Dichte:

$$\rho = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

- Körperzentriert: Ähnlich wie das einfache Gitter, nur dass eine Kugel direkt in der Mitte des Würfels dazukommt. Dazu müssen die Kugeln natürlich kleiner sein. Die Kugel in der Mitte berührt jede der anderen Kugeln, auf einer Diagonale durch den Würfel liegen daher genau zwei halbe und eine ganze Kugel. Wenn D der Durchmesser einer Kugel ist, so ist die Seitenlänge des Würfels damit $\frac{2D}{\sqrt{3}}$ und für dessen Volumen $\frac{8D^3}{3\sqrt{3}}$. Innerhalb des Würfels sind dieses Mal zwei Kugeln (Die in der Mitte plus acht Achtel). Dies entspricht einem Volumen von $\frac{\pi}{3}D^3$. Die relative Dichte ist damit:

$$\rho = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

- Flächenzentriert (siehe Vorlesungsfolien): Die Kugeln sitzen auf den Ecken und auf den Seitenflächen des Würfels. Der Durchmesser einer Kugel sei wieder D . Damit ist die Diagonale einer Würfelseite $2D$, die Seitenlänge daher $\sqrt{2}D$ und das Volumen $2\sqrt{2}D^3$. Innerhalb des Würfels sind dieses Mal vier Kugeln (acht Achtel von den Ecken plus sechs Hälften von den Seiten), die ein gemeinsames Volumen von $\frac{2\pi}{3}D^3$ haben. Es folgt für die relative Dichte:

$$\rho = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

2) Mehrzentrige Moleküle

Da wir annehmen, dass die einzelnen Moleküle starr sind, müssen die Kräfte zwischen den LJ-Zentren eines Moleküls nicht berechnet werden. Auf jedes Zentrum eines Moleküls wirken also die durch alle Zentren der anderen Moleküle verursachten Kräfte. Die Berechnung der Kraft auf ein Zentrum ist daher fast gleich wie im einzentrigen Fall. Nun ist die Frage, welche Auswirkung die Kraft auf ein Zentrum auf das zugehörige Molekül hat. Wenn die Wirkungslinie einer Kraft durch den Schwerpunkt eines Körpers geht, so bewirkt diese Kraft ausschließlich eine translatorische Beschleunigung. Geht die Wirkungslinie allerdings nicht durch den Schwerpunkt, so verursacht sie ein Moment, welches wiederum für eine rotatorische Beschleunigung sorgt. Das Moment entspricht dabei dem Produkt aus der Kraft und dem Abstand der Wirkungslinie zum Schwerpunkt. Um den Abstand nicht berechnen zu müssen, kann stattdessen das Kreuzprodukt aus dem Kraftvektor und den Verbindungsvektor zwischen LJ-Zentrum und Schwerpunkt verwendet werden:

$$\tau_{LJZ} = ((\vec{r}_{LJZ} - \vec{r}_{SP}) \times \vec{F}_{LJZ})$$

Damit folgt für das Moment auf das gesamte Molekül i

$$\tau_i = \sum_{LJZs} ((\vec{r}_{LJZ} - \vec{r}_{SP}) \times \vec{F}_{LJZ})$$

Zur Berechnung der translatorischen Beschleunigung wird die Formel $F = m \cdot a$ verwendet. Analog dazu gilt für die rotatorische Beschleunigung $\tau = \theta \cdot \frac{d\omega}{dt}$, wobei ω die Drehgeschwindigkeit und θ das Trägheitsmoment (analog zur Masse) ist. Für die Drehbeschleunigung gilt daher:

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{\tau}{\theta}$$

3) Diskretisierung

a) Taylor-Entwicklung:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \cdot \dot{\vec{r}}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \cdot \ddot{\vec{r}}(t) + \frac{\Delta t^3}{6} \cdot \dddot{\vec{r}}(t) + \dots$$

abschneiden nach der ersten Ableitung:

$$\begin{aligned}\vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \Delta t \cdot \dot{\vec{r}}(t) = \vec{r}(t) + \Delta t \cdot \vec{v}(t) \\ \vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}(t) + \Delta t \cdot \vec{a}(t)\end{aligned}$$

b) Um eine Taylor-Entwicklung höherer Ordnung durchführen zu können, benötigen wir die höheren Ableitungen. Der einzige Werte der ausser der Position direkt zur Verfügung steht, ist die zweite Ableitung. Die Geschwindigkeit und alle höheren Ableitungen stehen nicht zur Verfügung. Wenn man nun aber die Taylor-Entwicklung beidseitig (für $t + \Delta t$ und $t - \Delta t$) bis zur dritten Ableitung durchführt, so kürzen sich alle nicht bekannten Ableitungen raus:

$$\begin{aligned}\vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \Delta t \cdot \dot{\vec{r}}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \ddot{\vec{r}}(t) + \frac{\Delta t^3}{6} \cdot \dddot{\vec{r}}(t) + O(\Delta t^4) \\ \vec{r}(t - \Delta t) &= \vec{r}(t) - \Delta t \cdot \dot{\vec{r}}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \ddot{\vec{r}}(t) - \frac{\Delta t^3}{6} \cdot \dddot{\vec{r}}(t) + O(\Delta t^4)\end{aligned}$$

Die Formeln für beide Taylor-Entwicklungen unterscheiden sich nur im Vorzeichen vor den Ableitungen ungeraden Grades. Durch einsetzen folgt:

$$\vec{r}(t + \Delta t) + \vec{r}(t - \Delta t) = 2 \cdot \vec{r}(t) + \Delta t^2 \cdot \ddot{\vec{r}}(t) + O(\Delta t^4)$$

Die Gleichung für die neue Position lautet also:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2 \cdot \vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \cdot \ddot{\vec{r}}(t) + O(\Delta t^4)$$

- c)
- Zu Beginn der Simulation ist die Position der Partikel zum Startzeitpunkt bekannt. Das Störmer-Verlet-Verfahren benötigt aber die Position zu zwei Zeitpunkten.
 - Es muss ständig die Position zu zwei Zeitpunkten gespeichert werden
 - Die Geschwindigkeit wird nicht berechnet.

d) Beim Störmer Verlet Verfahren wurden die folgenden Formeln verwendet:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2 \cdot \vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \cdot \vec{a}(t) \quad (1)$$

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

Das Velocity-Störmer-Verlet-Verfahren ist durch diese Gleichungen gegeben:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \cdot \vec{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \vec{a}(t) \quad (3)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{(\vec{a}(t + \Delta t) + \vec{a}(t))\Delta t}{2} \quad (4)$$

Aus (2) folgt:

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t + \Delta t) - 2\Delta t \cdot \vec{v}(t) \quad (5)$$

Einsetzen von (5) in (1) führt nach weiteren Umformungen auf die Gleichung für die Position:

$$\begin{aligned} \vec{r}(t + \Delta t) &= 2 \cdot \vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + 2\Delta t \cdot \vec{v}(t) + \Delta t^2 \cdot \vec{a}(t) \\ 2 \cdot \vec{r}(t + \Delta t) &= 2 \cdot \vec{r}(t) + 2\Delta t \cdot \vec{v}(t) + \Delta t^2 \cdot \vec{a}(t) \\ \vec{r}(t + \Delta t) &= \vec{r}(t) + \Delta t \cdot \vec{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot \vec{a}(t) \end{aligned} \quad (6)$$

Um die Geschwindigkeitsgleichung herzuleiten, setzen wir (1) in (2) ein:

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \vec{a}(t) \quad (7)$$

Die selbe Formel einen Zeitschritt später lautet:

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t)}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \vec{a}(t + \Delta t) \quad (8)$$

Addieren von (7) und (8) ergibt:

$$\begin{aligned} \vec{v}(t) + \vec{v}(t + \Delta t) &= \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{\Delta t} + \frac{(\vec{a}(t + \Delta t) + \vec{a}(t))\Delta t}{2} \\ &= 2 \cdot \vec{v}(t) + \frac{(\vec{a}(t + \Delta t) + \vec{a}(t))\Delta t}{2} \\ \vec{v}(t + \Delta t) &= \vec{v}(t) + \frac{(\vec{a}(t + \Delta t) + \vec{a}(t))\Delta t}{2} \end{aligned}$$

- e) Um herauszufinden, ob eine Methode zeitumkehrbar ist, rechnet man zunächst einen diskreten Schritt mit Schrittlänge Δt aus und erhält damit die neue Position und Geschwindigkeit zum Zeitschritt $(t + \Delta t)$. Davon ausgehen rechnet man einen weiteren Schritt, dieses Mal aber in umgekehrter Richtung, also mit Schrittlänge $\tilde{\Delta t} = -\Delta t$. Das Ergebnis sind erneut Position und Geschwindigkeit zum Zeitschritt t . Wenn diese mit den ursprünglichen übereinstimmen, dann ist die Methode zeitumkehrbar. Die Gleichungen (3) und

(4) geben die Position und Geschwindigkeit zum Zeitpunkt $(t + \Delta t)$ an. Nun führen wir einen weiteren Schritt mit Schrittlänge $\tilde{\Delta t}$ durch:

$$\tilde{r}(t + \Delta t + \tilde{\Delta t}) = r(t + \Delta t) + \tilde{\Delta t} \cdot v(t + \Delta t) + \frac{\tilde{\Delta t}^2}{2} \cdot a(t + \Delta t) \quad (9)$$

$$\tilde{v}(t + \Delta t + \tilde{\Delta t}) = v(t + \Delta t) + \frac{\tilde{\Delta t}}{2} \cdot (a(t + \Delta t) + \tilde{a}(t + \Delta t + \tilde{\Delta t})) \quad (10)$$

Nun ersetzen wir $\tilde{\Delta t}$ durch $-\Delta t$ in 9:

$$\tilde{r}(t) = r(t + \Delta t) - \Delta t \cdot v(t + \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot a(t + \Delta t) \quad (11)$$

Einsetzen von (3) und (4) in (11):

$$\tilde{r}(t) = (r(t) + \Delta t \cdot v(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot a(t)) \quad (12)$$

$$- \Delta t \cdot (v(t) + \frac{\Delta t}{2} \cdot (a(t) + a(t + \Delta t))) + \frac{\Delta t^2}{2} \cdot a(t + \Delta t) \quad (13)$$

$$= r(t) \quad (14)$$

Damit haben wir bereits gezeigt, dass zumindest die Positionsgleichung umkehrbar ist. Daher gilt automatisch auch, dass $\tilde{a}(t)$ $a(t)$ entspricht. Als nächstes untersuchen wir noch die Geschwindigkeit. Indem wir in Gl. 10 $\tilde{\Delta t}$ durch $-\Delta t$ ersetzen, erhalten wir:

$$\tilde{v}(t) = v(t + \Delta t) - \frac{\Delta t}{2} \cdot (a(t + \Delta t) + \tilde{a}(t)) \quad (15)$$

$$= v(t + \Delta t) - \frac{\Delta t}{2} \cdot (a(t + \Delta t) + a(t)) \quad (16)$$

Einsetzen von (4) in (16):

$$\tilde{v}(t) = v(t) + \frac{\Delta t}{2} \cdot (a(t) + a(t + \Delta t)) - \frac{\Delta t}{2} \cdot (a(t + \Delta t) + a(t)) \quad (17)$$

$$= v(t) \quad (18)$$

Auch die Geschwindigkeitsberechnung ist somit umkehrbar und damit die gesamte Velocity-Störmer-Verlet Methode.