

Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II

Übungsblatt 1

1) Größenordnungen

Diese Aufgabe soll dazu dienen, ein Gefühl dafür zu bekommen, Systeme welcher Größenordnungen denn noch in einer sinnvollen Zeit auf molekularer Ebene simuliert werden können. Als anschauliches Beispiel versuchen wir (ohne weiter nach dem wissenschaftlichen Nutzen zu fragen), ein Maß Bier eine Sekunde lang auf molekularer Ebene zu simulieren. Ein Zeitschritt in der Simulation entspricht einer Femtosekunde. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass ein Liter Bier gleich viele Moleküle enthält wie ein Liter Wasser (molare Masse: $18 \frac{g}{mol}$). Schätzen Sie die benötigte Rechenzeit mit den folgenden vereinfachenden Annahmen großzügig nach unten ab.

- wir haben einen perfekten linearen Algorithmus, der in jedem Zeitschritt pro Molekül nur eine einzige Rechenoperation benötigt (sehr illusorisch!)
- wir haben unbegrenzt Rechenzeit auf dem derzeit schnellsten Höchstleistungsrechner mit einer Peak Performance von ca. 1 Petaflops (ebenfalls sehr illusorisch!)
- wir sind perfekte Programmierer und erreichen mit unserer Implementierung immer die Peak Performance (s.o.)

Was fällt Ihnen auf? Unter der Annahme, dass das Moorsche Gesetz weiterhin gilt, ab wann lohnt es sich, mit der Simulation zu beginnen?

2) Startkonfiguration

Für eine Simulation des Edelgases Argon soll eine Startkonfiguration in dimensionsloser Formulierung erstellt werden. Die Länge eines Zeitschrittes beträgt $2.17 fs$.

Das Simulationsgebiet ist ein Würfel mit der Kantenlänge $1\mu m$. Zu Beginn der Simulation soll das Gas unter Normalbedingungen vorliegen, d.h. mit einem Druck von einem Bar und einer Temperatur von $273.15K$. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass alle Atome betragsmäßig die gleiche Geschwindigkeit haben. Berechnen Sie die folgenden Werte (Die mit * gekennzeichneten Werte sind dimensionslos anzugeben):

- N : Anzahl an Atomen im Simulationsgebiet
- L^* : Kantenlänge des Simulationsgebiets
- dt^* : Zeitschrittlänge
- v^* : Geschwindigkeit eines Atoms
- T^* : Temperatur

3) Zwei-Körper Potentiale

- a) Der Zusammenhang zwischen einer Kraft und dem zugehörigen Potential ist durch die folgende Formel gegeben:

$$F(r) = -U'(r)$$

- Bei einer Springfeder ist die Kraft gegeben durch das Hooksche Gesetz: $F(r) = -k(r - r_0)$, wobei r_0 die Anfangsauslenkung ist, bei der keine Kraft wirkt.
- Zwischen zwei Himmelskörpern wirkt Gravitationskraft, die durch $F = -\frac{m_1 m_2 g}{r^2}$ gegeben ist

Leiten Sie für beide Kräfte das zugehörige Potential her und zeichnen Sie sowohl Kraft als auch Potential in ein Schaubild.

- b) In der Vorlesung wurden verschiedene Zwei-Körper Potentiale zur Modellierung der Kräfte zwischen Atomen behandelt. Untersuchen Sie die Potentiale im Hinblick auf die Kraft, die zwei Atome in Abhängigkeit von ihrem Abstand aufeinander ausüben. Versuchen Sie dabei folgende Fragen zu beantworten:
- Wie gut ist das Potential für die Implementierung auf einem Rechner geeignet?
 - Bei welchem Abstand ist die Kraft, die die Atome aufeinander ausüben, minimal?